Вестник

Российско-Армянского (Славянского) университета

N1

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ И ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

ISSN 1829-0450

ЕРЕВАН 2013

РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ (СЛАВЯНСКИЙ) УНИВЕРСИТЕТ

В Е С Т Н И К

СЕРИЯ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ

И ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

№1

Издательство РАУ

Ереван 2013

Печатается по решению Ученого совета РАУ

Вестник РАУ. №1 – Ер.: Изд-во РАУ, 2013. – с. 82.

Журнал входит в перечень периодических изданий зарегистрированных ВАК РА

Российско-Армянский (Славянский) Университет, 2013 г.

ISBN 1829-0450

МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

Поступила 18.12.2012 г.

УДК 517.518

CHARACTERIZATION OF n-INDEPENDENT SETS OF $\leq 3n$ POINTS IN R^d

A. Malinyan

Russian-Armenian (Slavonic) University
e-mail: argishti.malinyan@gmail.com

Abstract. All n-independent sets of $\leq 3n$ points in R^2 are characterized in paper [4]. In this paper we characterize all n-independent sets of $\leq 3n$ points in R^d.

The results remain true also in the case of C^d.
Keywords: Fundamental polynomial, independent point set.

1. Introduction, characterizations of independent point sets

Let us start with some notations. Denote

$$\overline{x} = (x_1, x_2, ..., x_d), \quad \alpha = (\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_d),$$

$$\overline{x}^\alpha = x_1^{\alpha_1} \cdot x_2^{\alpha_2} \cdot ... \cdot x_d^{\alpha_d}, \quad |\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + ... + \alpha_d .$$

Denote also by $\prod_n^d = \prod_n(R^d)$ the space of polynomials in d variables of total degree not exceeding n:

$$\prod_n^d = \left\{ p(\overline{x}) = \sum_{|\alpha| \leq n} a_\alpha \overline{x}^\alpha, a_\alpha \in R, \overline{x} \in R^d \right\}.$$

In the case $d = 2$ we denote briefly $\Pi_n = \Pi_n^2$.

We have that

$$N := N_n^d := \dim \prod_n^d = \binom{n+d}{d}.$$

Let us fix a set of points:

$$X_S := \left\{ \overline{x}^{(1)}, \overline{x}^{(2)}, \ldots, \overline{x}^{(s)} : \overline{x}^{(i)} \in R^d \right\}.$$

The problem of finding a polynomial $p \in \prod_n^d$ satisfying the conditions

$$p(\overline{x}_i) = c_i, \quad i = 1, 2, \ldots, s, \tag{1.1}$$

is called interpolation problem and denoted briefly by $(\prod_n^d, X_s)$.

The polynomial p is called a data interpolating or just interpolating polynomial.

Definition 1.1. *The interpolation problem* $(\prod_n^d, X_s)$ *is called solvable, if for any set of values* $\{c_1, c_2, \ldots c_s\}$ *there exists a polynomial* $p \in \prod_n^d$ *satisfying the conditions (1.1).*

We call a polynomial $p \in \prod_n^d$ fundamental, or n-fundamental, for the point $A = \overline{x}_k \in X_s$ and denote it by $p_k^* := p_A^* := p_{A, X_s, n, d}^*$, if

$$p(\overline{x}_i) = \delta_{ki}, \quad i = 1, 2, \ldots, s,$$

Where δ is the Kronecker symbol.

Evidently a polynomial (from $\prod_n^d$) vanishing at all points but A is a constant times a fundamental polynomial. Sometimes it is convenient for us to call such polynomials fundamental too.

Definition 1.2. *A set* X *is called* $\prod_n^d$*-independent, or briefly* n*-independent, if all its fundamental polynomials* $p_A^* \in \prod_n^d$, $A \in X$*, exist.*

Since the fundamental polynomials are linearly independent we get that the following is a necessary condition for n-independence:

$$s \le N.$$

In the case of independence we have the following Lagrange formula for a polynomial satisfying interpolating conditions (1.1):

$$p = \sum_{i=1}^{N} c_i p_i^*.$$

Next we bring the first characterization of n-independence:

Proposition 1.3. *A set* X *is* n*-independent in* R^d *if and only if the interpolation problem* $\left(\prod_n^d, X\right)$ *is solvable.*

Indeed, one side here follows from the Lagrange formula and another side follows from the fact that the fundamental polynomials are solutions of particular interpolation problems.

Now let us discuss the poisedness.

Definition 1.4. *A set X_s is called $\prod_n^d$-poised, or briefly n-poised, if for any set of values $\{c_1, c_2, ..., c_s\}$ there exists a unique polynomial $p \in \prod_n^d$ satisfying the conditions (1.1).*

Evidently the following is a necessary condition for the poisedness:

$$s = N.$$

Denote by $p|x$ the restriction of p on X. By using an elementary fact of Linear Algebra we get

Proposition 1.5. The interpolation problem $\left(\prod_n^d, X_N\right)$ is not poised if and only if

$$\exists p \in \prod_n^d \quad p \neq 0, \quad p(\overline{x}_i) = 0, i = 1, 2, ..., N.$$

Or, in other words, the interpolation problem $\left(\prod_n^d, X_N\right)$ is not poised if and only if there is an algebraic curve of degree $\leq n$ passing through all the points of X_N. The following two propositions characterize n-independent sets as subsets of n-poised sets (see [2], Lemma 2.1).

Proposition 1.6. *Any n-independent set X_s with $s < N$ can be enlarged to an n-poised set.*

Next we bring the characterization of n-independence of X_s in terms of linear independence of some s vectors in R^N.

The Vandermonde matrix $V_n(X_s)$ for the point set $X_s = \{\overline{x}^i\}_{i=1}^s$ and $\prod_n^d$ is the following determinant:

$$V_N(X) = \begin{pmatrix} 1, x_1^1, ..., x_d^1, ..., (x_1^1)^n, (x_1^1)^{n-1} x_2^1, ..., (x_d^1)^n \\ 1, x_1^2, ..., x_d^2, ..., (x_1^2)^n, (x_1^2)^{n-1} x_2^2, ..., (x_d^2)^n \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ 1, x_1^s, ..., x_d^s, ..., (x_1^s)^n, (x_1^s)^{n-1} x_2^s, ..., (x_d^s)^n \end{pmatrix}.$$

Thus $V_N(X)$ is an $s \times N$-determinant.

Obviously we have that the interpolation problem $\left(\prod_n^d, X_N\right)$ is n-poised if and only if $\det V_N(X_N) \neq 0$.

Proposition 1.7. *A set X is n-independent if and only if the set of N-vectors corresponding to X is linearly independent.*

Indeed, let $X = X_s$. The existence of all fundamental polynomials means that the linear hull of the column vectors of the Vandermonde matrix $V_n(X_s)$ contains the vectors $(1,0,\dots,0),(0,1,0,\dots,0),\dots,(0,\dots,0,1) \in R^s$. Therefore the rows of the matrix are linearly independent.

2. Independence of sets of $\leq n+1$ and $\leq 2n+1$ points

Later we will use the following known results.

Theorem 2.1 *(Severi, see [3] Theorem 8). Any set of $\leq n+1$ points in R^d is n-independent.*

Proposition 2.2 *(see [1] Proposition 1)*. *Any set of $\leq 2n+1$ points in R^2 is n-independent if and only if no $n+2$ of them are collinear. Moreover in the case of independence each point has a fundamental polynomial which is product of lines.*

Now we get readily the following corollary:

Corollary 2.3. *The following statements hold true for lines*:

i) Any set of $\leq n+1$ points situated on a line is n-independent.

ii) Any set of $\geq n+2$ points situated on a line is n-dependent.

Theorem 2.4 *(see [3] Theorem 6). The problem (Π_n^k, X) is solvable, with all the points of X belonging to an m- dimensional $(1 \leq m < k)$ linear subspace L, if and only if the problem (Π_n^m, X) is solvable.*

Let $X = \{x^{(i)}\}_{i=1}^s$ and $Y = \{y^{(i)}\}_{i=1}^s$.

Remark 2.5 *(see [3] Remark 7 ii)). If the problem (Π_n^m, X) is solvable, with $\{x^{(i)}\}_{i=1}^s$ all belonging to an m- dimensional $(1 \leq m < d)$ linear subspace L, then so is the problem (Π_n^d, Y), where the projection of $y^{(i)}$ on L is $x^{(i)}$, $i = 1,\dots,s$.*

Remark 2.6 *(see [5] Remark 1.7 iii)). The set X is n-independent if and only if the set TX is n-independent, where T is a nonsingular linear transformation.*

In this section we use the same letter, say p, to denote a polynomial $p \in \Pi_n$ and the curve for which $p(x,y)=0$ is an equation. More precisely, suppose $p \in \Pi_n$ is a polynomial without multiple factors. Then the curve of degree $\leq n$ with an equation

$$p(x,y)=0$$

we call also p. The lines, conics, cubics and the corresponding polynomials we denote by α,β,γ, respectively. By conic or cubic we mean algebraic curves of degree 2 and 3, respectively.

Theorem 2.7 *(see [4] Theorem 5.3)***.** *Suppose that a set of points X is given with $\#X \le 3n$ in R^2. Then we have that X is n- dependent if and only if one of the following statements holds:*

i) *There are $n+2$ collinear points in X,*

ii) *There are $2n+2$ points of X belonging to a conic $\beta \in \Pi_2$,*

iii) *$\#X = 3n$ and there is a cubic $\gamma \in \Pi_3$ and a curve $\sigma \in \Pi_n$ such that $\gamma \cap \sigma = X$.*

For next definition we need the following notations:

Suppose L is a hyperplane in R^d, a is a vector in R^d which is not parallel to L, and A is a point in R^d. Denote by $l_A := l_{A,a}$ the line passing through A with a direction vector a.

Definition 2.8. We call A', a point from L, the projection of A with direction a in L, if $A' = l_A \cap L$.

Corollary 2.9. *Suppose that a set of points X is given in R^d, L is a hyperplane in R^d, a is a vector in R^d which is not parallel to L. If the problem $(\Pi_n^d, X_{L,a})$ is solvable then so is the problem (Π_n^d, X), where $X_{L,a}$ are the projections of the points of X along the direction a on L.*

Proof. Suppose, without loss of generality, that L is given by an equation $x_d = 0$. Let $a = (a_1, a_2, ..., a_d)$. From conditions we have that $a_d \ne 0$. Let us denote the set of projections of points of X on L by X_L. Consider the following linear transformation $x' = Tx$, where T is the following matrix:

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & a_1/a_d \\ 0 & 1 & \cdots & a_2/a_d \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}.$$

It is easily seen, that T is nonsingular, $TL = L$ and projections of our points from R^d in $(x_1', x_2', ..., x_d')$ coordinates on L coincide with projections in $(x_1, x_2, ..., x_d)$ coordinates on L along a. We have that the problem $(\Pi_n^d, X_{L,a})$ is solvable. Now according to Remark 2.6 the problem (Π_n^d, X_L) is solvable too. Finally according to Remark 2.5 the problem (Π_n^d, X) is solvable which finishes the proof.

3. Independence of $\leq 3n$ points in R^d

In this section by a plane in R^d we mean a two-dimensional plane.

In this section we will prove our main result.

Theorem 3.1. *Suppose that a set of points X is given with $\# X \leq 3n$ in R^d. Then we have that X is n- dependent if and only if one of the following statements holds*:

i) *There are $n+2$ collinear points in X,*

ii) *There are $2n+2$ points of X belonging to a conic $\beta \in \Pi_2$ in a plane,*

iii) *$\# X = 3n$ and there is a cubic $\gamma \in \Pi_3$ and a curve $\sigma \in \Pi_n$ in a plane such that $\gamma \bigcap \sigma = X$.*

Let us first prove the followingthree lemmas.

Lemma 3.2. *Suppose that a set of $3n, n \geq 2$, points X is given in R^d and $A \in X$. Suppose also that*

1) *X is not coplanar and there are $3n-1$ coplanar points in X,*

2) *There are no $n+2$ collinear points in X one of which is A,*

3) *There are no $2n+2$ coplanar points of X belonging to a conic one of which is A.*

Then there is a fundamental polynomial $p_A^* = p_{A,X,n,d}^*$ for the point A in X.

Proof. Let us find a fundamental polynomial $p_{A,X,n,d}^*$. Let us denote by L the plane which contains $3n-1$ points from X, by A_1 the point from X which is not belonging to L.First assume that $A \notin L$. It is easily seen that a hyperplane which is containing plane L and does not pass point A will be a fundamental polynomial for the point A. Now assume, that $A \in L$. In view of condition 1) and Theorem 2.7 a set of $3n-1$ coplanar points $X_1 = X \setminus \{A_1\}$ is n-independent. Without loss of generality assume that the plane L is coincident with $\{x_i = 0; i = 3, 4, ..., d\}$. Let us denote a fundamental polynomial for point A in X_1 by $p_{A,X_1,n,2}^*(x_1, x_2)$. Let us denote also the projection of point of A in the plane L by A_L. First assume that $p_{A,X_1,n,2}^*(A_L) = 0$, i.e., A_L is lying on the curve given by a fundamental polynomial of point of A. In this case we have that $p_{A,X,n,d}^*(x_1, x_2, ..., x_d) = p_{A,X_1,n,2}^*(x_1, x_2)$ is a fundamental polynomial of point of A in X. Now assume, that $p_{A,X_1,n,2}^*(A_L) \neq 0$, i.e., A_L is not lying on the curve given by a fundamental polynomial of point of A. In this case we can find a direction a and apply a linear transformation discussed in Corollary 2.9, such that $p_{A,X_1,n,2}^*(A') = 0$, where A' is the projection of the point A by the direction a. In

this case we have that $p^*_{A,aX,n,d}(x_1,x_2,...,x_d)=p^*_{A,X_1,n,2}(x_1,x_2)$ is a fundamental polynomial of the point of A in X', where $X'=(X\setminus\{A\})\bigcup\{A'\}$.

Lemma 3.3. *Suppose that a set of* 6 *points* X_0 *is given in* R^d. *Suppose also that*

4) X_0 *is not coplanar,*

5) *There are no 4 collinear points in* X_0.

Then X_0 *is two independent.*

Proof. Here we will discuss three cases.

Case 1. There are 5 points in X_0 belonging to a (two-dimensional) plane denoted by L. Let us find a fundamental polynomial p^*_A for the point $A\in X_0$. First assume that $A=A_1$ is the point in X_0 outside of L, i.e., $A\notin L$. In this case for fundamental polynomial we take a hyperplane which contains the plane L and does not pass through the point A. Now assume $A\in L$.According to Proposition2.2 the five points of $X_1=X_0\bigcap L$ are 2-independent in L if no four of them are collinear and for any point the fundamental polynomial is a product of 2 lines. Let us denote by l_1 and l_2 the components of fundamental polynomial of the point A for the set X_1. Denote also by L_1 the plane, which is passing through the line l_1 and point A_1, and by L_2 a plane which is passing through l_2 and is different from L. It is clear that $A\notin L_1\bigcup L_2$. Now it is easily seen that we can choose $p^*_A=H_1H_2$, where H_1 and H_2 are hyperplanes which contain planes L_1, L_2, respectively, and do not pass through point A.

Case 2. There are 4 points in X_0 belonging to a plane denoted by L. Suppose, in view of case 1, that the remaining two points are outside of L. Let us construct a fundamental polynomial p^*_A for the point $A\in X_0$. First assume that $A=A_1\notin L$. Let us denote by A_2 the other point outside of L. Denote also by H_1 a hyperplane which is passing through point A_2, but not point A. Then it is clear, that $p^*_A=HH_B$, where H is a hyperplane which contains plane L and is not passing through point A. Now suppose that $A\in L$. According to Proposition 2.2 the four points are 2-independent in L if they are not collinear. Also for any point the fundamental polynomial is a product of 2 lines. Let us denote by l_1 and l_2 the components of this fundamental polynomial. Denote by L_i the plane passing through point A_i and line l_i, $i=1,2$. Now it is easily seen that we can choose $p^*_A=H_1H_2$, where H_i is a hyperplane which contains the plane L_i and does not pass through point A.

Case 3. There are no 4 coplanar points in X_0. Let us construct a fundamental polynomial p_A^* for the point $A \in X_0$. Denote by L_1 the plane passing through the tree remaining points. It is clear, that $A \notin L_1$. Denote by L_2 a plane passing through other two points and not passing through A. Now it is easily seen that we can choose $p_A^* = H_1 H_2$, where H_i is a hyperplane which contains the plane L_i and does not pass through point A.

Lemma 3.4. Suppose that a set of $3n, n \geq 2$, points X is given in R^d and $A \in X$. Suppose also that

6) *X is not coplanar and moreover there are no $3n-1$ coplanar points in X,*

7) *There are no $n+2$ collinear points in X one of which is A,*

8) *There are no $2n+2$ coplanar points of X belonging to a conic one of which is A.*

Then there is a fundamental polynomial $p_A^* = p_{A,X,n,d}^*$ for the point A in X.

Proof. Here we will apply induction by n. The case $n = 2$ is proved in Lemma 3.3. Now assume that the statement holds for the case $n-1$, we will prove it for n.

Here we will discuss five cases.

Case 1. There are two lines passing through the point A and n other points from X each.Let us denote these lines by l_1 and l_2. In view of condition 6) there is a point B which is not in the plane containing the lines l_1, l_2. Let us denote by L the plane passing through the point B and two points $A_i, i = 1, 2$, where A_i is a point from l_i different from A.It is clear that $A \notin L$. Let us show that a set of $3(n-1)$ points $X_1 := X \setminus \{B, A_1, A_2\}$ satisfies either the statements of the Lemma for case $n-1$ or Lemma 3.2. In view of 6) X_1 is not coplanar, therefore either the condition 1) or 6) is satisfied in the case of $n-1$. Next let us show, that X_1 satisfies the condition 7) (which coincides with condition 2)) in the case of $n-1$, i.e., there are no $(n-1)+2 = n+1$ collinear points in X_1 one of which is A.Indeed, the lines l_1, l_2 are passing through n points one of which is A.The number of remaining points is $(3n-3)-(2n-1) = n-2$.Finally let us show, that X_1 satisfies the condition 8) (which coincides with condition 3)) in the case of $n-1$, i.e., there are no $2(n-1)+2 = 2n$ points belonging to a conic one of which is A.Indeed, the conic with the components l_1 and l_2 contains $(n-1)+(n-1)+1 = 2n-1$ points one of which is A.On the other hand a conic passing through remaining $n-2$ points can pass also at most 4 points one of which is A.Thus, by the induction hypothesis, there exists a fundamental polynomial $p_{A,X_1,n-1,d}^*$ for point A in X_1. Now it is easily seen

that we can choose $p^*_{A,X,n,d} = p^*_{A,X_1,n-1,d}H$, where H is a hyperplane which contains the plane L and does not pass through point A.

Case 2. There is a line l passing through the point A and n other points from X and there is a conic β passing through point A and $2n-1$ other points from X. In view of condition 6) we can assume that l and β are not contained in the same plane. Let us denote by B the point from l different from A by A_1, A_2 the points from β different from A. Let us denote also by L the plane passing through points B, A_1, A_2. It is clear that $A \notin L$. Let us show that a set of $3(n-1)$ points $X_1 := X \setminus \{B, A_1, A_2\}$ satisfies either the statements of the Lemma for case $n-1$ or Lemma 3.2. It is clear that X_1 is not coplanar, therefore either the condition 1) or 6) is satisfied in the case of $n-1$.Next let us show, that X_1 satisfies the same condition 7) (which coincides with condition 2)), i.e., there are no $(n-1)+2 = n+1$ collinear points in X_1 one of which is A. Indeed, the line l contains n points from X_1 one of which is A, and the remaining points are belonging to the conic β. Finally let us show, that X_1 satisfies the condition 8) (which coincides with condition 3)) in the case of $n-1$, i.e., there are no $2(n-1)+2 = 2n$ points belonging to a conic one of which is A. Indeed, the conic β contains at most $2n-2$ points on of which is A. And the remaining points are belonging to the line l. Thus, by the induction hypothesis, there exists a fundamental polynomial $p^*_{A,X_1,n-1,d}$ for point A in X_1. Now it is easily seen that we can choose $p^*_{A,X,n,d} = p^*_{A,X_1,n-1,d}H$, where H is a hyperplane which contains the plane L and does not pass through point A.

Case 3. There is an irreducible conic β passing through the point A and $2n-1$ or $2n$ other points from X. Let us denote by L the plane containing the conic β. In view of condition 6) there is a point which is not belonging in L. Let us denote this point by B. Let us denote also by A_1, A_2 the points from β different from A and by L_1 the plane passing through points B, A_1, A_2. It is clear that $A \notin L_1$. Let us show that a set of $3(n-1)$ points $X_1 := X \setminus \{B, A_1, A_2\}$ satisfies either the statements of the Lemma for case $n-1$ or Lemma 3.2. It is clear that X_1 is not coplanar, therefore either the condition 1) or 6) is satisfied in the case of $n-1$.Next let us show, that X_1 satisfies the same condition 7) (which coincides with condition 2)), i.e., there are no $(n-1)+2 = n+1$ collinear points in X_1 one of which is A. Indeed, if the $n-2$ or $n-1$ remaining number of pointsare not in the plane L, they can be collinear with A which is not contradict to condition 7). In the other hand, in view of 6), the maxi-

mum number of remaining points which are lying in L is $n-2$. In this case the line passing through remaining points and A can pass also at most one point from β which is not contradicts to condition 7) too. Finally let us show, that X_1 satisfies the condition 8) (which coincides with condition 3)) in the case of $n-1$, i.e., there are no $2(n-1)+2=2n$ points belonging to a conic one of which is A. Indeed, the conic β contains at most $2n-1$ points on of which is A.The number of remaining points is $(3n-3)-(2n-1)=n-2$.Thus, by the induction hypothesis, there exists a fundamental polynomial $p^*_{A,X_1,n-1,d}$ for point A in X_1. Now it is easily seen that we can choose $p^*_{A,X,n,d}=p^*_{A,X_1,n-1,d}H$, where H is a hyperplane which contains the plane L_1 and does not pass through point A.

Case 4. There is a line l passing through the point A and n other points from X. In views of case1 and case 2 other points are not lying on a conic and there is no line passing through point A and n other points from. Let us denote by A_1 the point from l different from A. Let us denote also by A_2 and A_3 the points from X such that the plane L containing the points A_1, A_2, A_3 does not pass the point A.Let us show that a set of $3(n-1)$ points $X_1 := X \setminus \{A_1, A_2, A_3\}$ satisfies either the statements of the Lemma for case $n-1$ or Lemma 3.2. It is clear that X_1 is not coplanar, therefore either the condition 1) or 6) is satisfied in the case of $n-1$.Next let us show, that X_1 satisfies the same condition 7) (which coincides with condition 2)), i.e., there are no $(n-1)+2=n+1$ collinear points in X_1 one of which is A. Indeed, the line l contains n points one of which is A and there is no line passing through the point A and more then n points from X_1. Finally let us show, that X_1 satisfies the condition 8) (which coincides with condition 3)) in the case of $n-1$, i.e., there are no $2(n-1)+2=2n$ points belonging to a conic one of which is A. Indeed, there isno conic containing $2n$ points one of which is A which is in the same plane with the line l. And the other number of remining points is $(3n-3)-n-2n-3$. Thus, by the induction hypothesis, there exists a fundamental polynomial $p^*_{A,X_1,n-1,d}$ for point A in X_1. Now it is easily seen that we can choose $p^*_{A,X,n,d}=p^*_{A,X_1,n-1,d}H$, where H is a hyperplane which contains the plane L and does not pass through point A.

Case 5.There is no line passing through the point A and other n points from X and there is no conic passing through the point A and other $\geq 2n-1$ points from X.Let us denote by L the plane which pass the point A and contains maximum number of points from X. It is clear that L contains $\leq 3n-2$ points from X.Let us denote by A_1, A_2 the points from L such that A, A_1, A_2 are not coplanar. Let us de-

note also by A_3 any point from X such that the plane L_1 passing through the points A_1, A_2, A_3 such that L_1 does not pass the point A.Let us show that a set of $3(n-1)$ points $X_1 := X \setminus \{A_1, A_2, A_3\}$ satisfies either the statements of the Lemma for case $n-1$ or Lemma 3.2. It is clear that X_1 is not coplanar, therefore either the condition 1) or 6) is satisfied in the case of $n-1$.Next it is clear, that X_1 satisfies the same condition 7) (which coincides with condition 2)), i.e., there are no $(n-1)+2=n+1$ collinear points in X_1 one of which is A. Finally it is clear, that X_1 satisfies the condition 8) (which coincides with condition 3)) in the case of $n-1$, i.e., there are no $2(n-1)+2=2n$ points belonging to a conic one of which is A. Thus, by the induction hypothesis, there exists a fundamental polynomial $p^*_{A,X_1,n-1,d}$ for point A in X_1. Now it is easily seen that we can choose $p^*_{A,X,n,d} = p^*_{A,X_1,n-1,d} H$, where H is a hyperplane which contains the plane L and does not pass through point A.

From Lemma 3.2, 3.3 and 3.4 we get readily the following

Corollary 3.5. *Suppose that a set of $\le 3n$ points X is given in R^d. Suppose also that*

9) *X is not coplanar,*

10) *There are no $n+2$ collinear points in X,*

11) *There are no $2n+2$ coplanar points of X belonging to a conic.*

Then X is n-independent in R^d.

Proof. First assume that $\# X < 3n$. In this case we can construct $X' = X \bigcup \{x^{(1)}, ..., x^{(i)}\}; i = 3n - \# X$ by easily adding a sufficient number of points up to $3n$ such that the statements 10) and 11) stay true for X' too. In view of condition 9) X' is not coplanar yet. Now without loss of generality assume that $\# X = 3n$. The case $n=1$ is obvious, since any three not collinear points in R^d are 1-independent. Next if $n=2$ then 2-independence of 6 points follows from Lemma 3.3. Now let us discuss two cases. First assume that there is a point such that other $3n-1$ points are coplanar. According to Lemma 3.2 X is n-independent in R^d. Now assume that any subset of $3n-1$ points of X is not coplanar. In this case according to Lemma 3.4 X is n-independent in R^d.

Now we are in a position to formulate our basic result.

Theorem 3.1. *Suppose that a set of points X is given with $\# X \le 3n$ in R^d. Then we have that X is n- dependent if and only if one of the following statements holds:*

i) *There are $n+2$ collinear points in X,*

ii) *There are $2n+2$ points of X belonging to a conic $\beta \in \Pi_2$ in a plane,*

iii) $\# X = 3n$ *and there is a cubic* $\gamma \in \Pi_3$ *and a curve* $\sigma \in \Pi_n$ *in a plane such that* $\gamma \bigcap \sigma = X$.

Proof. The inverse implication follows readily from Theorems 2.4 and 2.7. Let us prove the right implication. First assume that X is contained in a plane. Then from Theorem 2.7 we have that one of i), ii), iii) conditions holds. Now let us assume that X is not coplanar. In this case according to Corollary 3.5 one of the conditions i), i)) holds. Thus the right implication is proved too.

REFERENCES

1. *Eisenbud D., Green M. and Harris J.* Cayley-Bacharach theorems and conjectures, Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.) 33(3), 295–324 (1996).
2. *Hakopian H., Jetter K., Zimmermann G*. Vandermonde matrices for intersection points of curves, Jaen J. Approx. 1 no. 1, 67–81 (2009).
3. *Hakopian H.* On a class of Hermite interpolation problems, Adv.Comput.Math., 12, 303–309 (2000).
4. *Hakopian H., Malinyan A*. Characterization of n-independent sets with no more than $3n$ points, Jaen J. Approx. 4(2), 121–136 (2012).
5. *Hakopian H*. On the regularity of Multivariate Hermite interpolation, J. Approx, Theory 105, 1–8 (2000).

n-ԱՆԿԱԽ $\leq 3n$ ԿԵՏԵՐԻ ԲԱԶՄՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԲՆՈՒԹԱԳՐՈՒՄԸ R^d-ՈՒՄ

Ա. Մալինյան

n-Անկախ $\leq 3n$ կետերի բազմությունները R^2-ում բնութագրված են [4]-ում: Այս աշխատանքում մենք բնութագրում ենք բոլոր n-անկախ $\leq 3n$ կետերի բազմությունները R^d-ում:

Բոլոր արդյունքները ճիշտ են նաև C^d-ում:

ХАРАКТЕРИСТИКА МНОЖЕСТВ n-НЕЗАВИСИМЫХ $\leq 3n$ ТОЧЕК В R^d

А. Малинян

Все n-независимые множества $\leq 3n$ точек в R^2 охарактеризованы в работе [4]. В данной статье мы характеризуем все n-независимые множества $\leq 3n$ точек в R^d.

Все эти результаты остаются правильными и в C^d.

Поступила 14.02.2013 г.

УДК 517.951

О НЕКОТОРЫХ СВОЙСТВАХ ГИПОЭЛЛИПТИЧЕСКИХ ОТНОСИТЕЛЬНО ГРУППЫ ПЕРЕМЕННЫХ МНОГОЧЛЕНА

В.Н. Маргарян, С.Р. Айрапетян

Российско-Армянский (Славянский) университет
e-mail: vachagan.margaryan@yahoo.com, sofia31337@mail.ru

Аннотация. В работе исследуются некоторые свойства многочленов, гипоэллиптических относительно группы переменных. Получена связь между частично гипоэллиптическим и гипоэллиптическими относительно группы переменных многочленов, а также исследованы свойства характеристических многогранников данных многочленов.
Ключевые слова: гипоэллиптичность, частичная гипоэллиптичность, гипоэллиптичность относительно группы переменных.

§1. Основные обозначения и определения

Пусть $N-$ множество натуральных чисел, $N_0 = N \bigcup \{0\}$, N_0^n множество n-мерных мультииндексов, т.е. точек $\alpha = (\alpha_1,\dots,\alpha_n), \alpha_j \in N_0 \quad j=1,\dots,n,$ $R^n - n$-мерное вещественное эвклидово пространство точек $\xi = (\xi_1,\xi_2,\dots,\xi_n)$, $C = R \times Ri(i^2=-1)$, $R_+^n \equiv \{\xi \in R^n, \xi_j \ge 0, j=1,\dots,n\}$ и $R_0^n = \{\xi \in R^n, \xi_1,\dots,\xi_n \ne 0\}$. Для $\xi,\, \eta \in R^n$, $k,\, r \in N_0, 1 \le k < n, 1 \le r \le n,$ $t \in R_+,\, \lambda \in R_+^n$ и $\alpha \in N_0^n$ обозначим $(\xi,\eta) = \xi_1\eta_1 + \dots + \xi_n\eta_n$, $\xi \cdot \eta = (\xi_1 \cdot \eta_1, \dots, \xi_n \cdot \eta_n)$, $\xi' = (\xi_1,\dots,\xi_k)$, $\xi'' = (\xi_{k+1},\dots,\xi_n)$, $\xi = (\xi', \xi'')$, $\xi(r) = (\xi_1, \dots, \xi_{r-1}, \xi_{r+1}, \dots, \xi_n)$, $|\xi| = (\xi_1^2 + \dots + \xi_n^2)^{1/2}$, $t^\lambda = (t^{\lambda_1},\dots,t^{\lambda_n})$, $\xi^\alpha =$

$=\xi_1^{\alpha_1}\ldots\xi_n^{\alpha_n}$, $|\alpha|=\alpha_1+\ldots+\alpha_n$, $\alpha!=\alpha_1!\ \ldots\ \alpha_n!$ и $D^\alpha=D_1^{\alpha_1}\ldots D_n^{\alpha_n}$, где $D_j=\dfrac{\partial}{\partial\xi_j}$ $j=1,\ldots,n$.

Если класс гипоэллиптических многочленов достаточно хорошо изучен (регулярный многочлен гипоэллиптичен тогда и только тогда, когда его характеристический многогранник вполне правильный), то класс частично гипоэллиптических и гипоэллиптических относительно группы переменных многочленов не совсем изучен.

Целью настоящей работы является нахождение необходимых условий для характеристического многогранника данного многочлена, чтобы он являлся частично гипоэллиптическим или гипоэллиптическим относительно группы переменных.

Пусть,

$$P(\xi)=P(\xi_1,\ldots,\xi_n)=\sum_\alpha a_\alpha\xi^\alpha$$

$a_\alpha\in C$ многочлен, где сумма распостраняется по конечному набору $(P)\equiv\{\alpha,\ \alpha\in N_0^n, a_\alpha\neq 0\}$.

В дальнейшем будем считать, что $D_1P\cdot\ldots\cdot D_nP\neq 0$.

Характеристическим многогранником (х. м.) набора (P), многочлена P называется минимальный выпуклый многогранник $\Re(P)\subset R_+^n$, содержащий множество $(P)\bigcup\{0\}$.

Многогранник $\Re(P)\subset R_+^n$ называется правильным (вполне правильным), если компоненты всех внешних (относительно $\Re$) нормалей $(n-1)$-мерных некоординатных граней $\Re$ неотрицательны (положительны).

Для х. м. $\Re(P)$ набора $(P)\subset N_0^n$ через $\Re^0(P)$, $\Lambda(\Re(P))$, $\Lambda^+(\Re(P))$ и $\partial\Re(P)$ обозначим:

$\Re^0(P)$ – множество вершин многогранника $\Re(P)$, $\Lambda(\Re(P))$ – множество единичных, внешних (относительно $\Re(P)$) нормалей $(n-1)$-мерных некоординатных граней $\Re(P)$,

$$\Lambda^+(\Re(P))\equiv\{\lambda\in\Lambda(\Re(P))\ \ \lambda>0\ \ (\lambda\in\mathcal{R}_+^n\cap R_0^n)\},$$

$$\partial\Re(P)\equiv\{\nu\in\Re(P),\ \exists\lambda\in\Lambda(\Re(P))\ \ (\nu,\lambda)=d(\lambda)\},$$

где $d(\lambda) \equiv \max_{\nu \in \Re(P)} (\nu, \lambda)$.

Грань Γ многогранника $\Re \subset R_+^n$ называется главной, если существует (внешняя) нормаль λ этой грани, для которой при некоторой $j: 1 \le j \le n \;\; \lambda_j > 0$.

Определение 1 (см. [1] определение 11.1.2). Многочлен $P(\xi) = P((\xi_1, \ldots, \xi_n))$ называется гипоэллиптическим, если для любого $0 \ne \alpha \in N_0^n$ при $|\xi| \to \infty \quad (\xi \in R^n) \;\; D^\alpha P(\xi) / P(\xi) \to 0$.

Определение 2 (см. [1] определение 11.1.4 или [2]). Многочлен $P(\xi) = P((\xi_1, \ldots, \xi_n))$ называется частично гипоэллиптическим относительно ξ', если выполняется одно из следующих эквивалентных условий:

1. для любого $0 \ne \alpha \in N_0^n$ *при* $|\xi| \to \infty$, когда $\xi'' \equiv (\xi_{k+1}, \ldots, \xi_n)$ остается ограниченным $D^\alpha P(\xi) / P(\xi) \to 0$,

2. если многочлен P представить в следующем виде:

$$P(\xi) = \sum_{\alpha^n \in N_0^{n-k}} \left(\xi''\right)^{\alpha''} P_{\alpha''}\left(\xi'\right)$$

a). многочлен $P_{0''}(\xi')$ гипоэллиптичен как многочлен от ξ',

b) $P_{\alpha''}(\xi') / P_{0''}(\xi') \to 0$ при $|\xi'| \to \infty \quad (\xi' \in R^k)$ для любого $0 \ne \alpha'' \in N_0^{n-k}$.

Определение 3 (см. [3]). Многочлен $P(\xi) = P((\xi_1, \ldots, \xi_n))$ называется гипоэллиптическим относительно ξ', если для любых $0 \ne \alpha \in N_0^n$ и последовательности $\{\xi^s\}_{s=1}^\infty \subset R^n$ при $s \to \infty$

$$D^\alpha P(\xi) / P(\xi) \to 0 \text{ как только } \left|\left(\xi'\right)^s\right| \to \infty \quad \text{при } s \to \infty.$$

Многочлен P называется регулярным (см. [4] или [5]), если существует постоянная $c > 0$ для которого

$$\sum_{\alpha \in \Re^0(P)} \left|\xi^\alpha\right| \le \mathrm{c}\left(\left|P(\xi)\right| + 1\right) \quad \forall \xi \in R^n.$$

В дальнейшем нам понадобится следующий легко проверяемый результат:
Замечание 1.1 (см. [6], [5] и [4]).

1) Если х. м. $\Re(P)$ регулярного многочлена P вполне правильный, то многочлен P гипоэллиптичен.

2) Если многочлен P гипоэллиптичен, то его х. м. $\Re(P)$ вполне правильный.

3) Любая $(n-1)$-мерная некоординатная грань х. м. $\Re \subset R_+^n$ главная.

4) Если х. м. $\Re(P)$ набора $(P) \subset N_0^n$ вполне правильный, то его любая некоординатная грань главная.

§2. Основной результат

Из определений 1) – 3) непосредственно следует:

Предложение 2.1. Пусть, $k, n \in N\, u\, k < n$. Если многочлен $P(\xi) = P((\xi_1, \ldots, \xi_n))$ гипоэллиптичен относительно $\xi' = (\xi_1, \ldots, \xi_k)$ (частично гипоэллиптичен относительно ξ'), то

1. для любого $j: 1 \le j \le k$ многочлен

$$Q_j((\xi_j; \xi'')) \equiv \mathrm{P}((0, \ldots, 0, \xi_j, 0, \ldots, 0, \xi''))$$

гипоэллиптичен относительно ξ_j (частично гипоэллиптичен относительно ξ_j), где $\xi'' = (\xi_{k+1}, \ldots, \xi_n)$

2. для любого $j: 1 \le j \le k$ многочлен,

$$Q_j((\xi'; \xi_j)) \equiv \mathrm{P}((\xi', 0, \ldots, \xi_j, 0, \ldots, 0))$$

гипоэллиптичен относительно ξ' (частично гипоэллиптичен ξ'),

3. если многочлен P гипоэллиптичен относительно ξ', то он частично гипоэллиптичен относительно ξ',

4. для любого $\xi'' \in R^{n-k}$ многочлен

$$\tilde{Q}_{\xi''}(\xi') \equiv P((\xi'; \xi''))$$

гипоэллиптичен как многочлен от ξ', следовательно (см. пункт 2) замечания 1.1) $\Re(\tilde{Q}_{\xi''}) \subset R_+^k$ является вполне правильным многогранником, и поэтому $\Lambda(\Re((\tilde{Q}_{\xi''})) = \Lambda^+(\tilde{Q}_{\xi''})$ при всех $\xi'' \in R^{n-k}$.

Теорема 2.1. Пусть, $k,n \in N$ и $k<n$. Если многочлен $P(\xi)= = P((\xi_1,\dots,\xi_n)) = \sum_{\alpha\in(P)} a_\alpha \xi^\alpha$ частично гипоэллиптичен относительно $\xi' =(\xi_1,\dots,\xi_k)$, то

1. для любого $\alpha \in (P)$, $\alpha' \equiv (\alpha_1,\dots,\alpha_k) \in N_0^k$, $0 \neq \alpha'' \equiv \equiv (\alpha_{k+1},\dots,\alpha_n) \in N_0^{n-k}$

$$\alpha' \in \mathfrak{R}(\tilde{Q}_0) \setminus \partial\mathfrak{R}(\tilde{Q}_0), \text{ где } \tilde{Q}_0(\xi') \equiv \mathrm{P}((\xi';0)).$$

2. для любого $\xi'' = (\xi_{k+1},\dots,\xi_n) \in R^{n-k}$ $\mathfrak{R}(\tilde{Q}_{\xi''}) = \mathfrak{R}(\tilde{Q}_0)$,

3. если для $\lambda = (\lambda_1,\dots,\lambda_n) \in \Lambda(\mathfrak{R}(P))$ при некотором $j: 1 \le j \le k$ $\lambda_j > 0$, то существует индекс $l: k+1 \le l \le n$, для которого $\lambda_l > 0$.

Доказательство. Докажем утверждение пункта 1) Пусть, наоборот, при условии леммы для некоторого $\beta \in (P), \beta'' \neq 0$ $\beta' \notin \mathfrak{R}(\tilde{Q}_0) \setminus \partial\mathfrak{R}(\tilde{Q}_0)$. В силу пункта 4) предложения 2.1 существует $\lambda' \in \Lambda^+(\mathfrak{R}(\tilde{Q}_0)) \subset R_+^k$ для которого

$$(\beta', \lambda') \ge \max_{\upsilon' \in \mathfrak{R}(\tilde{Q}_0)} (\upsilon', \lambda') \equiv d_{\tilde{Q}_0}(\lambda') > 0. \qquad (2.1)$$

Пусть, $A(P) \equiv \{\alpha \in (P), \alpha'' \neq 0\}$ и

$$d(\lambda') \equiv \max_{\alpha \in A(P)} (\upsilon', \lambda')$$

Так как $\beta \in A(P)$, то в силу (2.1)

$$d(\lambda') \ge d_{\tilde{Q}_0}(\lambda'). \qquad (2.2)$$

Пусть, для $\gamma \in A(P)$ $((\gamma', \lambda') = d(\lambda')), B(P) \equiv \{\alpha \in A(P), \alpha'' = \gamma''\}$ и $G(P) \equiv \{\alpha \in B(P), (\alpha', \lambda') = d(\lambda')\}$. Так как $\gamma \in G(P)$, то $G(P) \neq 0$.

Следовательно, существует точка $a \in R_0^k$, для которой

$$\sum_{\alpha \in G(P)} a_\alpha \gamma''! \cdot a^{\alpha'} \equiv c_1 \neq 0\,. \qquad (2.3)$$

Рассмотрим поведение отношения

$$D_{\xi''}^{\gamma''} P(\xi) / P(\xi)$$

на последовательности $\left\{\xi^{s}\right\}_{s=1}^{\infty} \subset R^{n}$, $(\xi^{'})^{s} = a \cdot s^{\lambda^{'}}$, $(\xi^{"})^{s} = 0$ $s = 1, 2 \ldots$. Так как при $\alpha \in B(P) \setminus G(P)$ в силу определений множеств $B(P)$ и $G(P)$, $\left(\alpha^{'}, \lambda^{'}\right) < d\left(\lambda^{'}\right)$, множество $B(P)$ конечно, то при $s \to \infty$ из определений последовательности $\left\{\xi^{s}\right\}_{s=1}^{\infty}$, многочлена $\tilde{Q}_0$ и чисел $d\left(\lambda^{'}\right)$, $d_{\tilde{Q}_0}\left(\lambda^{'}\right)$ в силу (2.3) с некоторой постоянной $c_2 > 0$ имеем

$$\left|D_{\xi^{"}}^{\gamma^{"}} P(\xi^{s}) / P(\xi^{s})\right| = \left|\sum_{\alpha \in (P), \alpha^{"} \geq \gamma^{"}} a_{\alpha} \cdot \frac{\alpha^{"}}{\left(\alpha^{"} - \gamma^{"}\right)!} \left(\left(\xi^{'}\right)^{s}\right)^{\alpha^{'}} \left(\left(\xi^{"}\right)^{s}\right)^{\alpha^{"} - \gamma^{"}}\right| / \left|P\left(\xi^{s}\right)\right| =$$

$$= \left|\sum_{\alpha \in (P), \alpha^{"} = \gamma^{"}} a_{\alpha} \cdot \gamma^{"}! \left(\left(\xi^{'}\right)^{s}\right)^{\alpha^{'}}\right| / \left|\tilde{Q}_0\left(\left(\xi^{'}\right)^{s}\right)\right| = \left|\sum_{\alpha \in B(P)} a_{\alpha} \cdot \gamma^{"}! \left(\left(\xi^{'}\right)^{s}\right)^{\alpha^{'}}\right| / \left|\tilde{Q}_0\left(\left(\xi^{'}\right)^{s}\right)\right| \geq$$

$$\geq \left(\left|\sum_{\alpha \in G(P)} a_{\alpha} \cdot \gamma^{"}! a^{\alpha^{'}}\right| s^{d\left(\lambda^{'}\right)} - \sum_{\alpha \in B(P) \setminus G(P)} \left|a_{\alpha} \cdot \gamma^{"}! a^{\alpha^{'}}\right| s^{\left(\alpha^{'}, \lambda^{'}\right)}\right) / \left|\tilde{Q}_0\left(\left(\xi^{'}\right)^{s}\right)\right| \geq$$

$$\geq c_1 \cdot s^{d\left(\lambda^{'}\right)} \left(1 + o(1)\right) / c_2 s^{d\left(\lambda^{'}\right)}.$$

Это, в силу неравенства (2.2), противоречит условию леммы, так как $\left\{\left(\xi^{"}\right)^{s} = 0\right\}_{s=1}^{\infty}$ (ограничено), а $\left\{\left(\xi^{'}\right)^{s}\right\} \to \infty$ при $s \to \infty$ $\left(\lambda^{'} \in \Lambda^{+}\left(\Re\left(\tilde{Q}_0\right)\right)\right)$. Полученное противоречие доказывает справедливость утверждения пункта 1).

Докажем утверждение пункта 2).

Пусть $\Pi^{'}(P) \equiv \left\{\alpha^{'} \in N_0^{k}, \exists \alpha^{"} \in N_0^{n-k} \quad \alpha \equiv \left(\alpha^{'}, \alpha^{"}\right) \in (P)\right\}$. Так как

$$\tilde{Q}_{\xi^{"}}(\xi^{'}) = \sum_{\alpha^{'} \in \Pi^{'}(P)} \left(\sum_{\alpha \equiv \left(\alpha^{'}, \alpha^{"}\right) \in (P)} a_{\alpha} \left(\xi^{"}\right)^{\alpha^{"}}\right) \left(\xi^{'}\right)^{\alpha^{'}} =$$

$$= \sum_{\alpha^{'} \in \Pi^{'}(P)} a_{\left(\alpha^{'}, o^{"}\right)} (\xi^{'})^{\alpha^{'}} + \sum_{\alpha^{'} \in \Pi^{'}(P)} \left(\sum_{\alpha \equiv \left(\alpha^{'}, \alpha^{"}\right) \in (P), \alpha^{"} \neq 0} a_{\alpha} \left(\xi^{"}\right)^{\alpha^{"}}\right) \left(\xi^{'}\right)^{\alpha^{'}} \equiv$$

$$\equiv \tilde{Q}_0\left(\xi^{'}\right) + L_{\xi^{"}}\left(\xi^{'}\right)$$

и в силу пункта 1) леммы для любого $\xi^{"} \in R^{n-k}$

$$\left(L_{\xi^{"}}\right)=\left\{\alpha^{'}\in\Pi^{'}\left(P\right),\sum_{\alpha\equiv\left(\alpha^{'},\alpha^{"}\right)\in(P),\,\alpha^{"}\neq 0}a_{\alpha}\left(\xi^{"}\right)^{\alpha^{"}}\neq 0\right\}\subset\Re\left(\tilde{Q}_0\right)\backslash\partial\Re\left(\tilde{Q}_0\right),$$

то отсюда непосредственно получаем утверждение пункта 2).

Докажем утверждение пункта 3). Предположим обратное, что при условии леммы существует $\lambda=(\lambda_1,\ldots,\lambda_n\in\Lambda)\left(\Re\left(P\right)\right)$ для которого при некотором $j:1\leq j\leq k\ \ \lambda_j>0$, в то время как $\lambda^{"}=\left(\lambda_{k+1},\ldots,\lambda_n\right)\leq 0$.

Представим многочлен P в виде суммы λ-однородных многочленов

$$P\left(\xi\right)=\sum_{j=0}^{M}P_j\left(\xi\right)=\sum_{j=0}^{M}\sum_{a\in(P),\,(a,\lambda)=d_j}a_{\alpha}\xi^{a}$$

где $d_0>\ldots>d_M$.

Так как λ – внешняя (относительно $\Re(P)$) нормаль к некоторой (n – 1)-мерной некоординатной грани, то существует мультииндекс $\beta\in(P_0)$ для которого $\beta^{"}\neq 0$.

Пусть $A(P_0)\equiv\left\{\alpha\in\left(P_0\right),\alpha^{"}\geq\beta^{"}\right\}$. Так как $A(P_0)\neq\varnothing$, то существуют точки $a\in R_0^k$ и $b\in R_0^{n-k}$ такие, что

$$\sum_{a\in A(P)}a_{\alpha}\cdot\frac{\alpha^{"}!}{\left(\alpha^{"}-\beta^{"}\right)!}a^{a^{'}}b^{\alpha^{"}-\beta^{h"}}\equiv c_3\neq 0. \qquad (2.4)$$

Рассмотрим поведение отношения:

$$D_{\xi^{"}}^{\beta^{"}}P(\xi)/P(\xi)$$

на последовательности $\left\{\xi^{s}\right\}_{s=1}^{\infty}\subset R^{n}$, $(\xi^{'})^{s}=\alpha\cdot s^{\lambda^{'}}$, $(\xi^{"})^{s}=b\cdot s^{\lambda^{"}}$ $s=1,2\ldots.$ В силу (2.4) при всех $s=1,2\ldots.$ имеем, что

$$\left|D_{\xi^{"}}^{\beta^{"}}P_0\left(\xi^{s}\right)\right|=\left|\sum_{a\in A(P_0)}a_{\alpha}\cdot\frac{\alpha^{"}!}{\left(\alpha^{"}-\beta^{"}\right)!}a^{a^{'}}b^{\alpha^{"}-\beta^{"}}s^{\left(a^{'},\lambda^{'}\right)+\left(\alpha^{"}-\beta^{"},\lambda^{"}\right)}\right|=c_3 s^{d_0-\left(\beta^{"},\lambda^{"}\right)}.$$

Так как, с некоторой постоянной $c_4>0$ при всех $s=1,2\ldots.$

$$\left|D_{\xi^{"}}^{\beta^{"}}P_j\left(\xi^{s}\right)\right|\leq c_4 s^{d_j-\left(\beta^{"},\lambda^{"}\right)}\quad j=1,\ldots,M,$$

$$\left|P\left(\xi^{s}\right)\right|\leq\sum_{j=0}^{M}\left|P\left(\xi^{s}\right)\right|\leq c_4\sum_{j=0}^{M}s^{d_j}=c_4 s^{d_0}\left(1+0(1)\right),$$

то отсюда, с некоторой постоянной $c_5 > 0$ при достаточно больших s имеем, что

$$\left| D_{\xi^{"}}^{\beta^{"}} P(\xi) / P(\xi) \right| \geq \frac{c_3 s^{d_0 - \left(\beta^{"}, \lambda^{"}\right)} \left(1 + 0\left(1\right)\right)}{c_4 s^{d_0} \left(1 + 0\left(1\right)\right)} = c_5 s^{d_0 - \left(\beta^{"}, \lambda^{"}\right)} \left(1 + 0\left(1\right)\right)$$

Это в силу предположения $\lambda^{"} \leq 0$ противоречит условию леммы, так как $\left(\xi^{'}\right)^s \to \infty$ $\left(\xi_j^s = a_j \cdot s^{\lambda_j} \to \infty, \lambda_j > 0\right)$ а $\left\{\left(\xi^{"}\right)^s\right\}_{s=1}^{\infty}$ ограничено $\left(\left(\xi^{"}\right)^s = b \cdot s^{\lambda^{"}}, \lambda^{"} \leq 0\right)$. Полученное противоречие доказывает справедливость утверждения пункта 3). Теорема 2.1 доказана.

<u>Теорема 2.2.</u> Пусть $n, k \in N u\, k < n$. Если многочлен

$$P\left(\xi\right) = P\left(\left(\xi_1, \ldots, \xi_n\right)\right) = \sum_{a \in (P)} a_\alpha \xi^a$$

гипоэллиптичен относительно $\xi^{'} \equiv \left(\xi_1, \ldots, \xi_k\right)$, то

1. для любого $\alpha \in \left(P\right), \alpha^{"} \neq 0$ $\alpha^{'} \in \Re\left(\tilde{Q}_0\right) \backslash \partial \Re\left(\tilde{Q}_0\right)$ где $\tilde{Q}_0\left(\xi^{'}\right) \equiv P\left(\left(\xi^{'}; 0^{"}\right)\right)$,

2. $\Re\left(\tilde{Q}_{\xi^{"}}\right) = \Re\left(\tilde{Q}_0\right) \quad \forall \xi^{"} \in R^{n-k}$,

3. для любого $c > 0$ существует постоянная $T > 0$ такая, что

$$\left| P\left(\xi\right) \right| \geq c, \forall \xi \in R^n, \left| \xi^{'} \right| \geq T, \tag{2.5}$$

4. если для $\lambda \in \Lambda\left(\Re\left(P\right)\right)$ при некоторой $j : 1 \leq j \leq k$ $\lambda_j > 0,$ то $\lambda \in \Lambda^{+}\left(\Re\left(P\right)\right)$,

5. если $\lambda \in \Lambda\left(\Re\left(P\right)\right)$ нормаль грани, для которой некоторая некоординатная грань $\Re\left(\tilde{Q}_0\right) \subset R^k$ является подгранью, то $\lambda \in \Lambda^{+}\left(\Re\left(P\right)\right)$.

<u>Доказательство.</u> Утверждение пунктов 1)-2) непосредственно следует из теоремы 2.1 и пункта 3) предложения 2.1.

Докажем утверждение пункта 3). Пусть, наоборот, при условии леммы существуют последовательность $\left\{\xi^s\right\}_{s=1}^{\infty} \subset R^n, \left|\left(\xi^{'}\right)^s\right| \to \infty$ при $s \to \infty$ и постоянная $c_1 > 0$ такие, что

$$\left| P\left(\xi^s\right) \right| \leq c_1, s = 1, 2, \ldots \; . \tag{2.6}$$

Так как, существует $0 \neq \alpha \in \mathfrak{R}^0(P)$, для которого $D^\alpha P(\xi) = a_\alpha \cdot \alpha! \neq 0$, то отсюда при всех $s = 1, 2, \ldots$ имеем, что

$$\left| D^\alpha P(\xi^s) / P(\xi^s) \right| \geq \left| a^\alpha \right| \cdot \alpha! / c_1 > 0.$$

Это противоречит условию леммы, так как $\left| (\xi')^s \right| \to \infty$ при $s \to \infty$. Полученное противоречие доказывает справедливость утверждения пункта 3).

Докажем утверждение пункта 4). Предположим обратное, что при условии леммы существуют $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_n) \in \Lambda(\mathfrak{R}(P))$ и индексы $j, l : 1 \leq j \leq k, 1 \leq l \leq n, j \neq l$ для которых $\lambda_j > 0$ и $\lambda_l \leq 0$. Представим многочлен P в виде суммы λ – однородных многочленов

$$P(\xi) = \sum_{j=0}^{M} P_j(\xi) = \sum_{j=0}^{M} \sum_{\alpha \in (P), (\alpha, \lambda) = d_j} a_\alpha \xi^\alpha$$

где $d_0 > \ldots > d_M$.

Пусть,

$$m \equiv \max_{\alpha \in (P_0)} a_l \text{ и } B(P) \equiv \left\{ \alpha \in (P_0), \alpha_l = m \right\}.$$

Так как $\lambda \in \Lambda(\mathfrak{R}(P))$, то очевидно, что $m > 0$. Из условия $B(P) \neq \varnothing$ следует, что существует точка $a \in R_0^n$, для которой

$$\sum_{a \in B(P)} a_\alpha \cdot m! a^{\alpha(l)}(l) \equiv c_2 \neq 0 \tag{2.7}$$

Рассмотрим поведение отношения $D_l^m P(\xi) / P(\xi)$ на последовательности $\left\{ \xi^s = a \cdot s^\lambda \right\}_{s=1}^\infty \subset R^n$. Для любого $s = 1, 2, \ldots$ из определений последовательности $\left\{ \xi^s \right\}_{s=1}^\infty$ и множества $B(P)$ в силу (2.7) имеем, что

$$\left| D_l^m P_0(\xi^s) \right| = \left| \sum_{a \in B(P)} a_\alpha \cdot m! a^{\alpha(l)}(l) s^{(\alpha(l), \lambda(l))} \right| = c_2 \cdot s^{d_0 - m \cdot \lambda_l}$$

Так как с некоторой постоянной $c_3 > 0$ при всех $s = 1, 2, \ldots$

$$\left| D_l^m P_0(\xi^s) \right| = c_3 \cdot s^{d_j - m \cdot \lambda_l},$$

$$\left| P(\xi^s) \right| \leq c_3 \cdot s^{d_0},$$

то отсюда, при достаточно больших s с некоторой постоянной $c_4 > 0$ имеем

$$\left|\frac{D_l^m P\left(\xi^s\right)}{P\left(\xi^s\right)} \geq c_2 \cdot \frac{s^{d_0 - m\cdot\lambda_l}\left(1+0(1)\right)}{c_3 \cdot s^{d_0}}\right| = c_4 \cdot s^{-m\cdot\lambda_l}\left(1+0(1)\right).$$

Это, в силу предположения $\lambda_l \leq 0$, противоречит условию леммы и доказывает справедливость утверждение пункта 4).

Докажем утверждение пункта 5). Пусть $\lambda = \left(\lambda_1, \ldots, \lambda_n\right) \in \Lambda\left(\Re\left(P\right)\right)$ нормаль грани для которого некоторая некоординатная грань $\Re\left(\tilde{Q}_0\right) \subset R^k$ является подгранью. Тогда $\lambda' = \left(\lambda_1, \ldots, \lambda_k\right)$ является (внешней относительно $\Re\left(\tilde{Q}_0\right)$) нормально некоординатной грани многогранника $\Re\left(\tilde{Q}_0\right)$. Поскольку, в силу пункта 4) предложения 2.1 и пункта 4) замечания 1.1 все некоординатные грани $\Re\left(\tilde{Q}_0\right)$ являются главными, то существует индекс $j : 1 \leq j \leq k$ для которого $\lambda_j > 0$. Тогда, в силу уже доказанного пункта 4), $\lambda \in \Lambda^+\left(\Re\left(P\right)\right)$ так как $\lambda \in \Lambda\left(\Re\left(P\right)\right)$. Этим утверждением пункта 5) и тем самым теорема 2.2 доказана.

Следствие 2.1. При условии теоремы 2.2

1. $\inf\left\{\left|P\left(s\right)\right|,\ \xi'' \in R^{n-1}\right\} \to \infty$ при $\left|\xi'\right| \to \infty$,

2. если $k = n-1$, то для любого $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_n) \in \Lambda\left(\Re\left(P\right)\right)$ $\lambda_j > 0$.

Доказательство. Утверждение пункта 1) непосредственно следует из пункта 3) лемма 2.2. Утверждение пункта 2) непосредственно следует из пункта 4) лемма 2.2 и пункта 3) замечания 1.1.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Хермандер Л.* Анализ линейных дифференциальных операторов с частными производными. М:Мир, т.2,1986.

2. *Gording L., Malgrange B.* Operateurs differentieles partiallement hypoelliptiques et partiellment elliptiques. Mah. Scand., 9, 5–21 (1961).

3. *R. J. Elliot.* Almost hypoelliptic differential operators. Proceed of the London Math. Society, 53–19(3), 537–552 (1969).

4. *Михайлов В. П.* О поведении на бесконечности одного класса многочленов. Тр. МИАН СССР, 91, 59–81 (1961).

5. *Volevich L., Gindikin S.* The Method of Newtons Polyhedrons in the Theory of PDE. Kluwer Acad. Publ., 1962.

6. *Никольский С.М.* Первая краевая задача для одного общего линейного уравнения. ДАН СССР, 144, №4, 767–769 (1962).

ON SOME PROPERTIES OF HYPOELLIPTIC POLYNOMIALS WITH RESPECT TO THE GROUP OF VARIABLES

V.N. Margaryan, S.R.Hayrapetyan

Abstract. In this paper some properties of hypoelliptic polynomials with respect to group of variables are studies. A relation between the partially hypoelliptic and hypoelliptic polynomials with respect to group of variables is obtained, and some properties of characteristic polynomials of these polyhedra are investigated.

Keywords: hypoellipticity, partial hypoellipticity, hypoellipticity respect to variables.

ՄԻ ԽՈՒՄԲ ՓՈՓՈԽԱԿԱՆՆԵՐԻ ՆԿԱՏՄԱՄԲ ՀԻՊՈԷԼԻՊՏԻԿ ԲԱԶՄԱՆԴԱՄՆԵՐԻ ՈՐՈՇ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ՄԱՍԻՆ

Վ.Ն.Մարգարյան, Ս.Ռ.Հայրապետյան

Ամփոփում: Աշխատանքում ուսումնասիրվում են մի խումբ փոփոխականների նկատմամբ հիպոէլիպտիկ բազմանդամների որոշ հատկություններ: Ստեղծված է կապ մասնակի հիպոէլիպտիկ և մի խումբ փոփոխականների նկատմամբ հիպոէլիպտիկ բազմանդամների միջև, ինչպես նաև ուսումնասիրված են տվյալ բազմանդամների բնութագրիչ բազմանկյունների հատկությունները:

Հիմնական բառեր: հիպոէլիպտիկ, մասնակի հիպոէլիպտիկ, մի խումբ փոփոխականների նկատմամբ հիպոէլիպտիկ:

ФИЗИКА, ХИМИЯ, БИОЛОГИЯ

Поступила 27.11.2012 г.

УДК 621.3

О ТРАНСПОРТНОМ СЕЧЕНИИ В БОРНОВСКОМ ПРЕДЕЛЕ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ

Л.Б. Овакимян

Институт радиофизики и электроники НАН РА, Аштарак-2

Аннотация. В квантовой теории столкновений существует общая теорема, согласно которой в борновском пределе малоуглового рассеяния ($\theta_q \ll 1$, где θ_q – дифракционный угол) транспортное сечение σ^B_{tr} не зависит от постоянной Планка $\hbar$. В настоящей работе на простом примере показано, что при выполнении условий теоремы величина σ^B_{tr} может иметь существенную зависимость от $\hbar$.

Ключевые слова: транспортное сечение, малоугловое рассеяние, борновское приближение

Из квантовой теории нерелятивистских столкновений известно, что в условиях применимости борновского приближения амплитуда f_B упругого рассеяния в центральном поле $[U(\mathbf{r}) = U(r)]$ имеет вид [1]

$$f_B = -(2m/\hbar^2)\int_0^\infty drU(r)j_0(qr)r^2 , \qquad (1)$$

$$q(\theta) = 2(m\mathrm{v}/\hbar)\sin(\theta/2) .$$

Здесь m – масса налетающей частицы с кинетической энергией $E = m\mathrm{v}^2/2,\ j_0(x) = x^{-1}\sin x, \theta$ – угол рассеяния. Формула (1) показывает, что быстрые частицы ($\lambda \ll a$, где $\lambda \sim \hbar/m\mathrm{v}$ – дебройлевская длина волны, a – характерный радиус взаимодействия) рассеиваются в основном вперед, в пределах узкого конуса с углом раствора [1]

$$\theta_q \sim \lambda / a << 1, \qquad (2)$$

причем конус сужается по мере роста скорости столкновения v .

В квазиклассическом пределе (2), когда борновское рассеяние происходит на малые углы, асимптотическое поведение при $E \to \infty$ транспортного сечения,

$$\sigma_{tr}^B = \int (1-\cos\theta) d\sigma = 2\pi \int_0^\pi (1-\cos\theta)\sin\theta \left| f_B(\theta) \right|^2 d\theta\,, \qquad (3)$$

детально обсуждалось с использованием фундаментальных характеристик “конуса рассеяния” в [1,2]. Известные соображения [1], полагающие, что в силу (2), эффективная область интегрирования в (3) имеет размер порядка $\theta \sim \theta_q$, позволили сделать общий вывод о том, что величина σ_{tr}^B обратно пропорциональна квадрату энергии [1, 2]

$$\sigma_{tr}^B(E) \propto E^{-2}\,,\; E \to \infty\,. \qquad (4)$$

Общие выкладки, базирующиеся на эйкональном приближении ($\lambda << a$, $|U_0| << E$, где U_0 – характерная энергия взаимодействия), позволили также заключить [2], что даже в борновском (“антиклассическом”) приближении выражение для транспортного сечения не содержит $\hbar$. В дальнейшей работе [3] это заключение о независимости $\sigma_{tr}^B(E \to \infty)$ от $\hbar$ приобрело статус общей теоремы о малоугловом рассеянии. Содержание теоремы иллюстрируется формулой [2],

$$\sigma_{tr}^B(E) \equiv \sigma_{tr}^C(E) \sim a^2\theta_c^2(E) \propto (\hbar^0 / E^2)\,,\; E \to \infty\,, \qquad (5)$$

где малый параметр $\theta_c(E) \sim |U_0| / E << 1$ играет роль характерного угла рассеяния для быстрых частиц ($|U_0| << E$) в классической механике [4]. Доводы в доказательство того, что результат борновского приближения совпадает с классическим $(\sigma_{tr}^B(E \to \infty) \equiv \sigma_{tr}^C(E \to \infty)[2,3])$ имеются также в недавно опубликованном обзоре [5].

Нужно сказать, что условие (2) является необходимым, но, вообще говоря, недостаточным для того, чтобы малые $\theta \sim \theta_q$ оказались доминирующими в транспортном сечении (3). Компонента Фурье от рассеивающего потенциала может иметь при $q \to \infty$ такие свойства, которые позволят взвешивающему фактору $1-\cos\theta$ активировать в (3) информацию о рассеянии назад. Цель настоящего краткого сообщения – показать на простом примере, как постоянной Планка удается с помощью асимптотики $f_B(q)$ проникнуть в структуру

$\sigma^B_{tr}(E \to \infty)$ и, таким образом, нарушить как теорему (5), так и скейлинговое соотношение (4).

Будем считать, что выполнено условие слабой связи

$$|U_0| << E_0 = \hbar^2 / 8ma^2,$$

и рассмотрим свойства борновской амплитуды рассеяния в поле

$$U(r) = U_0 (a/r)^{2-\varepsilon} \exp(-r/a), \; 0 < \varepsilon << 1. \tag{6}$$

Учитывая малость ε, из (1) и (6) находим

$$f_B(q) = f_B(0) \frac{\mathrm{arctg}(qa)}{(qa)[1+(qa)^2]^{\varepsilon/2}}, \tag{7}$$

где $f_B(0) = (-aU_0 / 4E_0)$ − не зависящая от E амплитуда, отвечающая рассеянию вперед $(\theta = 0, q = 0)$[1]. Полученное выражение для $f_B(q)$ имеет наглядный вид, хорошо иллюстрирующий анизотропный характер рассеяния в пределе высоких энергий. Действительно, из (7) и (2) следует, что сечение рассеяния на большие углы $\theta \sim 1$ мало по сравнению с сечением рассеяния вперед, $|f_B(\theta \sim 1)|^2 / |f_B(\theta < \theta_q)|^2 \sim \theta_q^{2(1+\varepsilon)} << 1$. Отметим еще, что в области больших передач импульса функция $f_B(q)$ убывает с ростом q по закону

$$f_B(q) \propto q^{-(1+\varepsilon)}, \; a^{-1} << q \to \infty. \tag{8}$$

Запомним, что у амплитуды рассеяния имеется длинный "хвост" (8), и приступим теперь к вычислению σ^B_{tr}. Для этой цели подставим (7) в (3) и перейдем от интегрирования по θ к интегрированию по $b = aq(\theta)$. После очевидных преобразований имеем

$$\sigma^B_{tr} = \sigma_0 \left(U_0 / E\right)^2 \int_0^\gamma db[b/(1+b^2)^\varepsilon]\mathrm{arctg}^2 b, \tag{9}$$

где $\sigma_0 = \pi a^2$ есть не что иное, как геометрическое сечение, а $\gamma = (E/E_0)^{1/2} \sim \theta_q^{-1} >> 1$.

Нетрудно убедиться, что для корректного анализа (9) ход рассуждений, развитый в [2], становится ненадежным. Действительно, в интеграле по b главную роль играет не область $b \sim 1 << \gamma \; (\theta \sim \theta_q << 1)$[2], а асимптотическая

---

[1] Любопытно, что между θ_c и квантовой амплитудой $f_B(0)$ имеется связь $|f_B(0)|/a \sim \theta_c(E_0) << 1$.

[2] Если молчаливо обрезать интеграл (9) при $b \sim 1 << \gamma(\hbar)$, то σ^B_{tr} приобретет, естественно, классическую структуру, $\sigma^B_{tr}(E) \sim \sigma_0 \left(U_0/E\right)^2 \sim a^2\theta_c^2(E)$ [см. теорему (5)].

область $1 << b \sim \gamma$ $(\theta_q << \theta \sim 1)$. Другими словами, основной вклад в $\sigma^B_{t\,r}(E)$ дают именно те амплитуды, которые ответственны за рассеяние назад. Поэтому из (9) в конечном счете получаем вместо классического результата (5) квантовый результат

$$\sigma^B_{t\,r}(E) \sim a^2 \left(U_0 / E_0\right)^2 (E_0 / E)^{1+\varepsilon} << a^2, \quad \left|U_0\right| << E_0 << E\,. \qquad (10)$$

Отсюда видно, что параметр ε, характеризующий профиль $U(r)$ в основной зоне взаимодействия $[U(r) \propto r^{(\varepsilon-2)}, r / a < 1]$, регулирует поведение транспортного сечения по следующему сценарию:

$$\sigma^B_{tr}(\varepsilon, \hbar, E) \propto \frac{\hbar^{2(\varepsilon-1)}}{E^{1+\varepsilon}},\ E \to \infty\,. \qquad (11)$$

Очевидно, что это скейлинговое соотношение существенно отличается от (4) и (5).

В заключение отметим, что при промежуточных энергиях $E \sim E_0 >> \left|U_0\right|$, когда борновское рассеяние становится изотропным $(\gamma \sim \theta_q \sim 1 >> \theta_c)$, квантовое сечение (10) преображается в $\sigma^B_{t\,r} \sim a^2 (U_0 / E_0)^2 \sim \left|f_B(0)\right|^2 \sim a^2 \theta_c^2 (E_0)$. Если же $E \sim E_0 \sim \left|U_0\right|$ $(\theta_q \sim 1 \sim \theta_c)$, то $\sigma^B_{t\,r} \sim a^2$.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука (1974), # 126.

2. *Дьяконов М.И., Хаецкий А.В.* О транспортном сечении при малоугловом рассеянии. ЖЭТФ, 99, №4, 1066–1067 (1991).

3. *Khaetskii A., Bauer G.E.W.* Geometrical effect of composite fermions. Phys. Rev. B, 51, №11, 7369–7372 (1995).

4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. М., Наука (1973), # 20.

5. *Shapiro B.* Cold atoms in the presence of disorder. J. Phys. A: Math. Theor., 45, №14, 143001 (38pp) (2012).

ՏՐԱՆՍՊՈՐՏԱՅԻՆ ԿՏՐՎԱԾՔԸ ՓՈՔՐ-ԱՆԿՅՈՒՆԱՅԻՆ ՑՐՄԱՆ ԲՈՐՆԻ ՍԱՀՄԱՆԱՅԻՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

Լ. Բ. Հովակիմյան

Բախումների քվանտային տեսությունում գոյություն ունի մի թեորեմ, որի համաձայն փոքր-անկյունային ցրման Բորնի սահմանային դեպքում ($\theta_q << 1$, որտեղ θ_q-ն դիֆրակցիայի անկյունն է) տրանսպորտային կտրվածքը [σ_{tr}^B] կախված չէ Պլանկի հաստատուն $\hbar$-ից: Սույն աշխատանքում պարզ օրինակով ցույց է տրված, որ թեորեմի պայմանների բավարարման դեպքում σ_{tr}^B-ը կարող է էականորեն կախված լինել $\hbar$-ից:

ON THE TRANSPORT CROSS SECTION IN THE BORN'S LIMIT OF SMALL-ANGLE SCATTERING

L. B. Hovakimian

Abstract: According to a general theorem existing in the quantum theory of collisions, in the Born's limit of small-angle scattering ($\theta_q << 1$, where θ_q is the diffraction angle) the transport cross section σ_{tr}^B is independent of the Planck's constant $\hbar$. Here we present a simple example to show that under the conditions of the theorem σ_{tr}^B may display an essential dependence on $\hbar$.

Keywords: transport cross-section, small-angle scattering, Born approximation

Поступила 26.09.2012 г.

УДК 530.145

КЛАССИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ТРЕХЧАСТИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ КАЛОДЖЕРО

Д. Арустамян, Г. Багунц

Арцахский государственный университет, Степанакерт
e-mail: gbaghunts@mail.ru

Аннотация. Методом разделения переменных построены классические решения трехчастичных моделей Калоджеро, ассоциированных с алгебрами Ли A_2 и G_2.

Ключевые слова: модель Калоджеро, алгебра Ли, трехчастичная модель

Введение

Модель Калоджеро [1] занимает особое место в длинном ряду интегрируемых систем классической механики, прежде всего, из-за необычного сочетания простоты формулировки и чрезвычайной сложности ее исследования.

Она задается очень просто формулируемым гамильтонианом,

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{P_i^2}{2} + \sum_{i<j} \frac{g^2}{\left(x_i - x_j\right)^2}\ , \ \left\{P_i, x_j\right\} = \delta_{ij}\ , \tag{1}$$

очевидным образом интерпретируемым как система N одномерных частиц, взаимодействующих по закону обратных квадратов. Казалось бы, эта система должна была быть предложена не в 1969 году, а, по крайней мере, на сто лет раньше, во времена Якоби. Однако даже доказательство ее интегрируемости является нетривиальной задачей, требующей применения специфической техники: метода L-A пары либо гамильтоновой редукции матричной механики [2]. Что же касается нахождения решений соответствующей квантовой системы, то здесь привлекаются т.н. операторы Данкла [3]. При этом модель Калоджеро имеет широкий спектр физических приложений, простирающийся от квантовой теории поля и физики черных дыр до физики конденсированных сред (см., например, недавний обзор [4]). Естественно, что столь содержательная модель не могла

остаться вне поля зрения специалистов в области математической и теоретической физики. Так, были предложены обобщения модели Калоджеро, свазанные с различными алгебрами Ли [5], а также их тригонометрические [6] и спиновые [7] аналоги.

С другой стороны, специфичность методов исследования модели Калоджеро обусловила ее изолированность в длинном ряду моделей интегрируемых систем классической и квантовой механики. В результате, отработанные в течение двух столетий методы почти не применялись при изучении модели Калоджеро. Исключением являются трехчастичные модели Калоджеро, допускающие разделение переменных. Собственно, именно они лежали в основе пионерской работы [1]. Однако в последние годы при исследовании модели Калоджеро стали предприниматься попытки применения стандартных методов гамильтоновой механики и дифференциальной геометрии [8–11]. Как правило, в качестве затравочного примера бралась трехчастичная модель Калоджеро. В частности, на ее примере была продемонстрирована эффективность использования переменных действие-угол. Посредством последних была установлена каноническая эквивалентность A_2 и G_2 моделей Калоджеро, их суперсимметричных расширений и т.д. [10]. Отметим, что в последнее десятилетие активно дискутировался вопрос (по крайней мере, локальной) экивалентности моделей Калоджеро и свободных частиц [12]: несмотря на наличие множества формул подобные утверждения представлялись спорными. Работы [8, 9] внесли ясность в этот вопрос, по крайней мере, для двух- и трехчастичного случаев. Кроме того, работа [11] прояснила природу суперинтегрируемости модели Калоджеро [13]. Отличительной чертой отмеченного цикла работ является выделение т.н. угловой части моделей Калоджеро: такой подход прменялся ранее, в частности, при построении расширенных суперсимметричных расширений трехчастичных моделей Калоджеро [14].

В представленной работе мы следуем методам и подходам указанной серии работ. Именно путем разделения переменных мы построим классические решения трехчастичных моделей Калоджеро, ассоциированных с A_2 и G_2 алгебрами Ли, и приведем явный вид решений уравнений движения в исходных координатах. Предложенный путь построения решений, следующий духу цикла [8–11], может рассматриваться как пример применения отмеченного выше дифференциально-геометрического подхода.

Работа организована следующим образом.

Во втором разделе мы детально опишем способ разделения переменных в трехчастичной A_2 модели Калоджеро и построим ее явные решения.

В третьем разделе мы, следуя методам предыдущего раздела, построим явные классические решения G_2 модели Калоджеро.

1. Трехчастичная A_2 модель Калоджеро.

N-частичная модель Калоджеро, задаваемая гамильтонианом (1), имеет очевидный интеграл движения – полный момент импульса. После его исключения путем перехода к системе центра масс мы приходим к (N-1)-мерной системе, известной как A_(N-1) рациональная модель Калоджеро. В частности, двухчастичная модель Калоджеро сводится к тривиальной одночастичной системе и не заслуживает отдельного рассмотрения. Таким образом, простейшим нетривиальным случаем является трехчастичный случай, явные решения для которого строятся в настоящем разделе. Для этого случая гамильтониан (1) принимает вид

$$H = \frac{p_1^2 + P_2^2 + P_3^2}{2} + g^2\left[\frac{1}{(x_1 - x_2)^2} + \frac{1}{(x_1 - x_3)^2} + \frac{1}{(x_2 - x_3)^2}\right]. \qquad (2)$$

Для исключения центра масс совершим ортогональное преобразование координат

$$y_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(x_1 + x_2 + x_3\right),\ y_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2x_1 - x_2 - x_3\right),\ y_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x_2 - x_3\right), \qquad (3)$$

и аналогичное преобразование для сопряженных им импульсов.

$$p_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(P_1 + P_2 + P_3\right),\ p_1 = \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2P_1 - P_2 - P_3\right),\ p_2 = \frac{!}{\sqrt{2}}\left(P_2 - P_3\right). \qquad (4)$$

Это преобразование каноническое, так что новые импульсы также сопряжены координатам. В новых координатах гамильтониан (2) принимает вид

$$H = \frac{p_0^2}{2} + \sum_{a=1}^{2}\frac{p_a^2}{2} + \frac{g^2}{2}\left[\frac{1}{y_2^2} + \frac{4}{\left(\sqrt{3}y_1 - y_2\right)^2} + \frac{4}{\left(\sqrt{3}y_1 - y_2\right)^2}\right]. \qquad (5)$$

Как видим, он расщепился на две части: действительно, первый член описывает движение центра масс системы и является интегралом движения. Оставшаяся часть описывает эффективно двумерную систему.

После перехода к к полярным координатам

$$y_1 = r\sin\varphi,\ y_2 = r\cos\varphi \qquad (6)$$

получим

$$H = \frac{p_0^2}{2} + \frac{p_r^2}{2} + \frac{p_\varphi^2}{2r^2} + \frac{9g^2}{r^2\cdot\cos^2 3\varphi}. \qquad (7)$$

Итак, мы пришли к разделению переменных в трехастичной модели Калоджеро. Она свелась к частице на окружности, задаваемой гамильтонианом

$$I(p_\varphi,\varphi)=\frac{p^2{}_\varphi}{2}+\frac{9g^2}{2\cos^2 3\varphi}. \qquad (8)$$

Воспользовавшись этим представлением, мы сейчас найдем явные решения системы на окружности. С этой целью зафиксируем энергию модели Калоджеро с исключенным центром масс

$$H-\frac{p_0^2}{2}\equiv E,$$

в результате чего получим

$$E=\frac{p_r^2}{2}+\frac{I(p_\varphi,\varphi)}{r^2} \qquad (9)$$

Ясно, что I является интегралом движения, так что приведенное выше уравнение описывает эффективно одномерную систему. Учитывая, что

$$\dot r=\frac{dr}{dt}=\{r,E\}=\frac{dE}{dp_r}=p_r \qquad (10)$$

получим

$$E=\frac{1}{2}\left(\frac{dr}{dt}\right)^2+\frac{I(p_\varphi,\varphi)}{r^2}. \qquad (11)$$

Соответственно

$$t=\int\frac{dr}{\sqrt{2E-\frac{2I}{r^2}}}=\int\frac{rdr}{\sqrt{2Er^2-2I}}=\int\left(2Er^2-2I\right)^{-\frac{1}{2}}rdr=$$
$$=\frac{1}{4E}\int\left(2Er^2-2I\right)^{-\frac{1}{2}}d\left(2Er^2-2I\right)=\frac{\sqrt{2Er^2-2I}}{2E}+C_1. \qquad (12)$$

В результате мы найдем эволюцию радиальной переменной r

$$r^2=\frac{2E^2(t+C_1)^2+I}{E},\ C_1=0, \qquad (13)$$

Теперь перейдем к нахождению эволюции угловой переменной φ. Из гамильтоновых уравнений движения имеем

$$\dot\varphi=\frac{d\varphi}{dt}=\{\varphi,E\}=\frac{\partial E}{\partial p_\varphi}=\frac{p_\varphi}{r^2}, \qquad (14)$$

Отсюда немедленно получаем

$$I = r^2\left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2 + V(\varphi), \text{ где } V(\varphi) = \frac{9g^2}{2\cos^2 3\varphi}. \tag{15}$$

Введя новый параметр эволюции,

$$T = \int\frac{dt}{r^2(t)} = \int\frac{dt}{2Et^2 + \frac{I}{E}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\int\frac{d\left(\sqrt{2}Et\right)}{I + (\sqrt{2}Et)^2} = \frac{1}{\sqrt{2I}}arctg\left(\sqrt{\frac{2}{I}}Et\right) + C_3, \tag{16}$$

мы приведем выражение (15) к виду

$$I = \frac{1}{2}\left(\frac{d\varphi}{dT}\right)^2 + V(\varphi) \tag{17}$$

Отсюда мы найдем прямым интегрированием

$$T = \int\frac{d\varphi}{\sqrt{2I - 2V(\varphi)}} = \int\frac{d\varphi}{\left(2I - \frac{9g^2}{\cos^2 3\varphi}\right)^{\frac{1}{2}}} =$$

$$= \frac{1}{3}\int\frac{d(\sin 3\varphi)}{\left(2I - 9g^2 - 2I\sin^2 3\varphi\right)^{\frac{1}{2}}} = \frac{1}{3\sqrt{2I}}\arcsin\left(\frac{\sin 3\varphi}{\frac{2I - 9g^2}{2I}}\right) + C_2. \tag{18}$$

Приняв во внимание выражение (16), мы получим,

$$\sin 3\varphi = \sqrt{1 - \frac{9g^2}{2I}}\sin\left(3arctg\left(\sqrt{\frac{2}{I}}Et\right) + c_0\right) \tag{19}$$

Совершив некоторые тригонометрические преобразования, можно привести полученное выражение к следующему виду:

$$\varphi(\alpha) = \frac{1}{3}\arcsin\left[\sqrt{1 - \frac{9g^2}{2I}}\cdot\frac{\alpha\left(3 - \alpha^2\right)}{\left(1 + \alpha^2\right)^{\frac{3}{2}}}\right]. \tag{20}$$

Здесь мы ввели обозначение

$$\alpha(t) = \sqrt{\frac{2}{I}}Et. \tag{21}$$

Итак, мы нашли эволюцию угловой переменной φ, и, таким образом, полностью проинтегрировали уравнения движения трехчастичной модели Калоджеро. В исходных декартовых координатах она описывается уравнениями

$$\begin{cases} x_1(t)=\frac{\sqrt{3}}{3}x_0+\frac{\sqrt{6}}{3}\cdot\sqrt{2Et^2+\frac{I}{E}}\cdot\sin\left[\frac{1}{3}\arcsin\left(\sqrt{1-\frac{9g^2}{2I}}\cdot\frac{\alpha(t)\left[3-\alpha^2(t)\right]}{\left[1+\alpha^2(t)\right]^{\frac{3}{2}}}\right)\right] \\ x_2(t)=\frac{\sqrt{3}}{3}x_0+\sqrt{\frac{2}{3}}\cdot\sqrt{2Et^2+\frac{I}{E}}\cdot\sin\left[\frac{1}{3}\arcsin\left(\sqrt{1-\frac{9g^2}{2I}}\cdot\frac{\alpha(t)\left[3-\alpha^2(t)\right]}{\left[1+\alpha^2(t)\right]^{\frac{3}{2}}}\right)-\frac{\pi}{3}\right] \\ x_3(t)=\frac{\sqrt{3}}{3}x_0-\sqrt{\frac{2}{3}}\cdot\sqrt{2Et^2+\frac{I}{E}}\cdot\sin\left[\frac{1}{3}\arcsin\left(\sqrt{1-\frac{9g^2}{2I}}\cdot\frac{\alpha(t)\left[3-\alpha^2(t)\right]}{\left[1+\alpha^2(t)\right]^{\frac{3}{2}}}\right)+\frac{\pi}{3}\right] \end{cases} \quad (22)$$

2. Трехчастичная G_2 модель Калоджеро

В этом разделе мы найдем решения уравнений движения для G_2 модели Калоджеро [5], описываемой гамильтонианом

$$H=\sum_{i=1}^{3}\frac{P_i^2}{2}+\sum_{i<j}\frac{2g^2}{\left(x_i-x_j\right)^2}+\sum_{\substack{i<j\\ j\neq k}}\frac{6f^2}{\left(x_i+x_j-2x_k\right)^2} \quad (23)$$

Эта модель также трансляционно-инвариантна, и ее полный момент импульса является интегралом движения. Соответственно, после перехода к системе центра масс, согласно формулам (3-4), мы придем к двумерной системе. Перейдя, в последней системе к полярным координатам (6), мы представим гамильтониан (23) в виде

$$H=\frac{p_0^2}{2}+\frac{p_r^2}{2}+\frac{p_\varphi^2}{2}+\frac{9}{r^2}\left[\frac{g^2}{\cos^2 3\varphi}+\frac{f^2}{\sin^2 3\varphi}\right]. \quad (24)$$

Введем обозначения

$$I\left(p_\varphi,\varphi\right)=\frac{p_\varphi^2}{2}+V(\varphi),.........V(\varphi)=9\left(\frac{g^2}{\cos^2 3\varphi}+\frac{f^2}{\sin^2 3\varphi}\right),\ E=H-\frac{p_0^2}{2}. \quad (25)$$

Ясно, что I задает гамильтониан некоторой системы на окружности, и является интегралом движения G_2 модели Калоджеро, тогда как E задает энергию G_2 модели Калоджеро в системе центра масс:

$$E=\frac{p_r^2}{2}+\frac{I\left(p_\varphi,\varphi\right)}{r^2}. \quad (26)$$

Как видим, эволюция радиальной переменной в G_2 модели задается теми же уравнениями, что и в A_2 модели, (19-11),.

Отличие состоит лишь в эволюции угловой переменной φ. Она также находится совершенно аналогично A_2 случаю:

$$T=\int\frac{d\varphi}{\sqrt{2I-2V(\varphi)}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\int\frac{d\varphi}{\sqrt{I-9\left(\frac{g^2}{\cos^2 3\varphi}+\frac{f^2}{\sin^2 3\varphi}\right)}}=$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\int\frac{\cos 3\varphi\cdot\sin 3\varphi\cdot d\varphi}{\sqrt{I\cos^2 3\varphi\cdot\sin^2 3\varphi-9g^2\sin^2 3\varphi-9f^2\cos^2 3\varphi}}= \tag{27}$$

$$=-\frac{1}{12}\int\frac{d\left(\cos 6\varphi\right)}{\sqrt{-\frac{I}{2}\cos^2 6\varphi+9\left(g^2-f^2\right)\cos 6\varphi+\left(\frac{I}{2}-9\left(g^2+f^2\right)\right)}}.$$

Для вычисления интеграла (27) введем обозначения

$$a\equiv\frac{I}{2},\ b\equiv 9\left(g^2-f^2\right),\ c\equiv\frac{I}{2}-9\left(g^2+f^2\right), \tag{28}$$

что сведет его к табличному интегралу.

В результате интеграл (27) принимает вид

$$T=-\frac{1}{12}\int\frac{d\left(\cos 6\varphi\right)}{\sqrt{-a\cos^2 6\varphi+b\cos 6\varphi+c}}= \\ =-\frac{1}{12\sqrt{a}}\arcsin\frac{2a\cos 6\varphi-b}{\sqrt{b^2+4ac}}+C_2. \tag{29}$$

С другой стороны,

$$T=\int\frac{dt}{r^2(t)}=\int\frac{dt}{2Et^2+\frac{I}{E}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\int\frac{d\left(\sqrt{2}Et\right)}{I+(\sqrt{2}Et)^2}=\frac{1}{\sqrt{2I}}arctg\left(\sqrt{\frac{2}{I}}Et\right)+C_3. \tag{30}$$

Отсюда находим

$$2a\cos 6\varphi-b=-\sqrt{b^2+4ac}\cdot\sin\left(6arctg\sqrt{\frac{2}{I}}Et\right)+C_5. \tag{31}$$

После некоторых тригонометрических манипуляций мы придем к выражению

$$\varphi\left(\alpha\right)=\frac{1}{6}\arcsin\left[\sqrt{\frac{b^2}{4a}+c}\cdot\frac{\alpha\left(\alpha^2-3\right)\left(1-3\alpha^2\right)}{\left(1+\alpha^2\right)^3}\right], \tag{32}$$

где a,b,c заданы выражениями (28), а α – выражением (21). Оно задает эволюцию угловой переменной.

Эволюция исходных декартовых координат задается выражениями

$$x_1(t)=\frac{\sqrt{3}}{3}x_0+\frac{\sqrt{6}}{3}\cdot\sqrt{2Et^2+\frac{I}{E}}\cdot\sin\left[\frac{1}{6}\arcsin\left(\sqrt{\frac{b^2}{4a}+c}\cdot\frac{\alpha(t)\cdot\left[\alpha^2(t)-3\right]\cdot\left[1-3\alpha^2(t)\right]}{\left[1+\alpha^2(t)\right]^3}\right)\right]$$

$$x_2(t)=\frac{\sqrt{3}}{3}x_0+$$

$$+\sqrt{\frac{2}{3}}\cdot\sqrt{2Et^2+\frac{I}{E}}\cdot\sin\left[\frac{1}{6}\arcsin\left(\sqrt{\frac{b^2}{4a}+c}\cdot\frac{\alpha(t)\cdot\left[\alpha^2(t)-3\right]\cdot\left[1-3\alpha^2(t)\right]}{\left[1+\alpha^2(t)\right]^3}\right)-\frac{\pi}{3}\right] \quad (33)$$

$$x_3(t)=\frac{\sqrt{3}}{3}x_0-\sqrt{\frac{2}{3}}\cdot\sqrt{2Et^2+\frac{I}{E}}\cdot\sin\left[\frac{1}{6}\arcsin\left(\sqrt{\frac{b^2}{4a}+c}\cdot\frac{\alpha(t)\cdot\left[\alpha^2(t)-3\right]\cdot\left[1-3\alpha^2(t)\right]}{\left[1+\alpha^2(t)\right]^3}\right)+\frac{\pi}{3}\right]$$

Заключение

Итак, мы построили методом разделения переменных, явные классические решения трехчастичных моделей Калоджеро, которые, после перехода к системе центра масс, ассоциируются с алгебрами Ли A_2 и G_2**.** К сожалению**,** мы не можем подобным образом найти рещения аналогичных четырех- и многочастичных систем. Тем не менее, нетривиальность динамики даже этих простейших систем представляется нам любопытной.

В заключение, хотим поблагодарить Армена Нерсесяна за постановку задачи и полезные обсуждения, а также Карена Арамяна за проявленный интерес к работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Calogero F.J.* Math. Phys. 10, 2191 (1969); ibid. 12, 419 (1971).
2. *Olshanetsky M., Perelomov A.* Phys. Rept. 71, 313 (1981); ibid. 94, 313, (1983);
Jevicki A., Levine H. Phys. Rev. Lett. 44, 1443 (1980);
Polychronakos A.P. Phys. Lett. B266, 29 (1991).
3. *Moser J.* Adv. Math. 16, 197 (1975).
4. *Polychronakos A.P. J.* Phys., 12793 (2006).
5. *Wolfes J.J.* Math.Phys. 15, 1420 (1974);
Calogero F., Marchioro C. J. Math. Phys. 15, 1425 (1974);
Olshanetsky M.A., Perelomov, A.M. Lett. Math. Phys. 2, 7.(1977)
6. *Sutherland B*. Phys. Rev. A4, 2019 (1971); ibid. 5, 1372 (1972).
7. *Minahan J.A*., *Polychronakos A.P*. Phys. Lett**.** B 326, 288 (1994).
Gorsky A., Nekrasov N., Nucl. Phys. B414, 213 (1994).
Polychronakos A.P, Phys. Rev. Lett. 74, 5153 (1995).
8. *Hakobyan T., Nersessian A*. Phys. Lett. A373, 1001 (2009);
Burdik C., Nersessian A., SIGMA, 5, 004 (2009).
9. *Lechtenfeld O., Nersessian A., Yeghikyan V*. [arXiv:1005.0464][hep-th]
10. *Hakobyan T., Nersessian A., Yeghikyan V. J.* Phys. A 42, 205206 (2009).
11. *Hakobyan T., Krivonos S., Lechtenfeld O., Nersessian A*., Phys.Lett. A374, 801 (2010)
12 *Wojciechowski S*. Phys. Lett**.** A95, 279 (1983);
Ranada M.F. J. Math. Phys 40 (1999) 236;
Harwood J.T., McLenaghan R.G.,.Smirnov R.G, Comm. Math.Phys.259, 679 (2005);
Sasaki R., Takasaki K.J. Math. Phys. 47, 01270 (2006).
13. *Gurappa N., Panigrahi P.K*. Phys. Rev. B59, R2490 (1999);
Ghosh P. Nucl. Phys. B595 (2001) 519;
Brzezinski T., Gonera C., Maslanka P. Phys. Lett. A254**,** 185 (1999).
Galajinsky A., Lechtenfeld O., Polovnikov K. Phys. Lett. B643, 221 (2006);
JHEP 0711, 008 (2007); ibid. 0903, 113 **(**2009).
14 *Bellucci S., Krivonos S., Sutulin A*. Nucl. Phys. B805, 24 (2008).

CLASSICAL SOLUTIONS OF THREE-PARTICLE CALOGERO MODELS

D. Arustamyan, G.Bagunts

Explisit classical solutions of the A_2 and G_2 Calogero models are constructed by mean of separation of variables.

ԵՌԱՄԱՍՆԻԿ ԿԱԼՈՋԵՐՈՅԻ ՄՈԴԵԼՆԵՐԻ ԲԱՍԱԿԱՆ ԼՈՒԾՈՒՄՆԵՐԸ

Դ. Առուստամյան, Գ.Բագունց

Փոփոխականների բաժանման միջոցով կառուցված են եռամասնիկ Կալոջերոյի մոդելների բացահայտ բասական լուծումները

Поступила 05.02.2013 г.

УДК 548.0.532.783

ИЗУЧЕНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ ХИМИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА АМФИФИЛЬНОЙ МОЛЕКУЛЫ В ФОСФОЛИПИДНОМ БИСЛОЕ

Г.Г. Бадалян

Ереванский государственный университет
hbadal@ysu.am

Аннотация. Методом минимизации свободной энергии фосфолипидного бислоя изучена зависимость химического потенциала μ амфифильной молекулы в бислое от степени диссоциации z полярных молекул и от числа CH_2– групп ξ углеводородного хвоста. Установлено, что химический потенциал молекулы при увеличении z уменьшается, то есть имеет место выделение теплоты системы, а при увеличении ξ, наоборот, увеличивается – имеет место поглощение.
Ключевые слова: фосфолипидный бислой, химический потенциал, амфифильная молекула.

В опубликованных нами ранее работах [1, 2] установлено, что структура бислоя, состоящего из заряженных молекул амфифильного (АФ) вещества, существенно зависит от равновесия сил электростатического отталкивания заряженных групп и Ван-дер-ваальсовского притяжения углеводородных хвостов молекул. Нарушение указанного равновесия сил приводит к изменению химического потенциала молекулы.

В настоящей работе изучена зависимость химического потенциала μ амфифильной молекулы в бислое от степени диссоциации z полярных молекул и от числа CH_2– групп ξ углеводородного хвоста.

Как и в работе [1], для вычисления $\mathbf{E}_{эл}$ используем решеточную модель (Рис. 1,2).

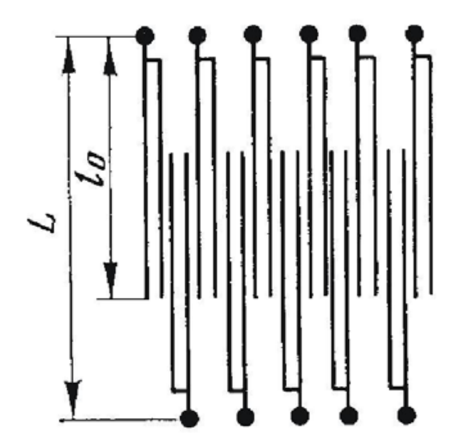


Рис. 1. Решеточная модель жидкокристаллического бислоя, образованного АФ молекулой.

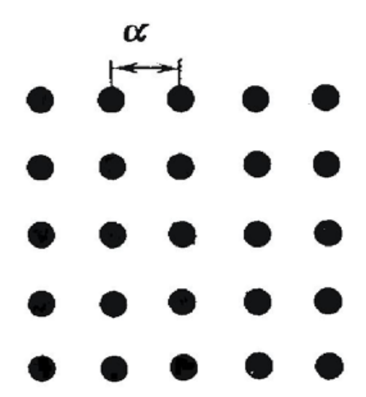


Рис.2. Решеточная модель расположения заряженных групп молекул на поверхности бислоя.

Предположим, что полярные группы молекул фосфолипида (каждая с точечным зарядом-ze, где z – степень диссоциации, e – заряд электрона) расположены в узлах прямоугольной решетки на плоских поверхностях раздела бислой-вода. Изменение свободной энергии бислоя, при переходе из жидкого в исследуемое состояние, представим в виде

$$\Delta F = E - E_1 - kTN \ln \frac{V_{f_1}}{V_f} \quad (1)$$

где E_1, V_{f_1} и E, V_f – энергии взаимодействий молекул и свободные объемы, приходящиеся на молекулу АФ вещества в бислое, соответственно в жидком и исследуемом состояниях.

Используя формулу (1), вычисляем, как в работе [2], но с учетом взаимодействия CH_2 – групп углеводородных цепочек молекул только с 8-мью ближайшими соседями. Получаем

$$\Delta F = \frac{(ze)^2}{2\pi\varepsilon_o\varepsilon}\frac{0.53}{\alpha}N^{3/2} - \frac{(ze)^2 LN}{4\varepsilon_o\varepsilon_2\alpha^2} + A\left(31 - 15L/l_0\right)\frac{\xi^5 N}{l_0^4\alpha^8} - \\ -2B\left(7 - 3L/l_0\right)\frac{\xi^3 N}{l_0^2\alpha^4} + \left(1 - z\right)\sigma_0 N\alpha^2 - NkT\ln\frac{2m}{N_A\alpha^2 L}, \quad (2)$$

где α – расстояние между ближайшими узлами решетки, т.е. между ближайшими зарядами, ε_1 – диэлектрическая проницаемость водной фазы на поверхности бислоя, ε_2 – диэлектрическая проницаемость углеводородной части бислоя, ε_0 – электрическая постоянная, L – толщина бислоя, A и B – константы Леннард-Джонсонского потенциала, l_0 – длина АФ молекулы, σ_0 – коэффициент поверхностного натяжения недиссоциированной поверхности, ρ_1 и ρ – плотность бислоя соответственно в жидком и исследуемом состояниях, m – молекулярная масса АФ вещества, N_A – число Авогадро, e – заряд электрона, $\frac{1}{\varepsilon} = \frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2}$.

Итак, $\Delta F = F(\alpha, L, N) - F_0(N)$, где $F(\alpha, L, N)$ и $F_0(N)$ – свободные энергии бислоя, соответственно в жидком и исследуемом состояниях.

Из условия минимизации имеем

$$\frac{\partial \Delta F}{\partial \alpha} = 0, \qquad \frac{\partial \Delta F}{\partial L} = 0, \qquad \frac{\partial \Delta F}{\partial N} = \mu$$

или

$$-\frac{(ze)^2}{2\pi\varepsilon_0\varepsilon}\frac{0.53}{\alpha}N^{3/2} + \frac{(ze)^2 LN}{2\varepsilon_0\varepsilon_2\alpha^2} - 8A(31 - 15L/l_0)\frac{\xi^5 N}{l_0^4\alpha^8} + \\ +8B(7 - 3L/l_0)\frac{\xi^3 N}{l_0^2\alpha^4} + 2(1 - z)\sigma_0 N\alpha^2 + 2kTN = 0 \quad (3)$$

$$-\frac{(ze)^2}{4\varepsilon_0\varepsilon_2\alpha^2} - 15A\frac{\xi^5}{l_0^5\alpha^8} + 6B\frac{\xi^3}{l_0^3\alpha^4} + \frac{kT}{L} = 0 \quad (4)$$

$$\mu = \frac{3}{2}\frac{(ze)^2}{2\pi\varepsilon_0\varepsilon}\frac{0.53}{\alpha}N^{1/2} - \frac{(ze)^2 L}{4\varepsilon_0\varepsilon_2\alpha^2} + A(31 - 15\,L/l_0)\frac{\xi^5}{l_0^4\alpha^8} - \\ - 2B(7 - 3\,L/l_0)\frac{\xi^3}{l_0^2\alpha^4} + (1-z)\sigma_0\alpha^2 + kT\ln\frac{2m}{N_A\alpha^2 L} \qquad (5)$$

Решая систему уравнений (3), (4), (5), для химического потенциала получим следующее выражение

$$\mu = \frac{\frac{3}{4}\frac{(ze)^2 kT}{\varepsilon_0\varepsilon_2\alpha^2} + kT\left(180A\frac{\xi^5}{l_0^5\alpha^8} - 36B\frac{\xi^3}{l_0^3\alpha^4}\right)}{\frac{(ze)^2}{4\varepsilon_0\varepsilon_2\alpha^2} + 15A\frac{\xi^5}{l_0^5\alpha^8} - 6B\frac{\xi^3}{l_0^3\alpha^4}} + \\ + 4(1-z)\sigma_0\alpha^2 - kT\ln\frac{2m}{N_A\alpha^2 kT}\left(\frac{(ze)^2}{4\varepsilon_0\varepsilon_2\alpha^2} + \right. \qquad (6) \\ \left. + 15A\frac{\xi^5}{l_0^5\alpha^8} - 6B\frac{\xi^3}{l_0^3\alpha^4}\right) + 2kT - 341A\frac{\xi^5}{l_0^4\alpha^8} + 70B\frac{\xi^3}{l_0^2\alpha^4}$$

Расчеты выполнялись при следующих значениях, полученных экспериментальным путем, где $\varepsilon_2 = 2.6$, $\sigma_0 = 3\cdot 10^{-2}$ Н/м, $m = 10^{-4}$ кг, $T = 300^o K$, $A = 0.88\cdot 10^{-133}$ м^{12}Дж, $B = 3.55\cdot 10^{-77}$ м^{6}Дж. Для определения зависимости длины l_0 АФ молекулы от числа CH_2 – групп ξ, используется следующая эмпирическая формула [3]

$$l_0 = (1.265\cdot\xi + 1.5)\,\overset{o}{A}$$

В выражение химического потенциала (6) входит величина α (расстояние между ближайшими узлами решетки), которая в общем случае зависит от степени диссоциации z и от числа CH_2 – групп ξ. Однако, как и в работах [4, 5], α при некоторых условиях может оставаться постоянным. В нашей работе выбрано значение α = 10^{-9}м., z меняется в интервале $z \in (0,1)$, а $\xi \in [6,18]$. При значениях $z <$ 0.5 результаты не совпадают с экспериментальными данными, поскольку здесь не учитывается влияние окружающих в домене ламеллов на бислой.

Из уравнения (6) видно, что μ функция от параметров ξ и z, $\mu = \mu(z,\xi)$. На Рис. 3 графически изображена зависимость $\mu = \mu(z)$, при $\xi = \xi_0 = 10$, а на рис. 4 – $\mu = \mu(\xi)$, при $z = z_0 = 0.5$.

Как видно из Рис. 3 и 4 с увеличением z в интервале $z \in [0.5 \div 1]$, значение μ уменьшается от $\mu = 5.96\cdot 10^{-19}$ Дж до $\mu = 5.29\cdot 10^{-19}$ Дж, а с увеличением ξ в

интервале $\xi \in [6,18]$ увеличивается от $\mu = 4.08 \cdot 10^{-19}$ Дж до $\mu = 9.37 \cdot 10^{-18}$ Дж. Такая же зависимость получается при всех значениях $z_0 \in [0.5 \div 1]$ и $\xi_0 \in [6,18]$ (т.е. рост z сопровождается уменьшением μ, а рост ξ – увеличением).

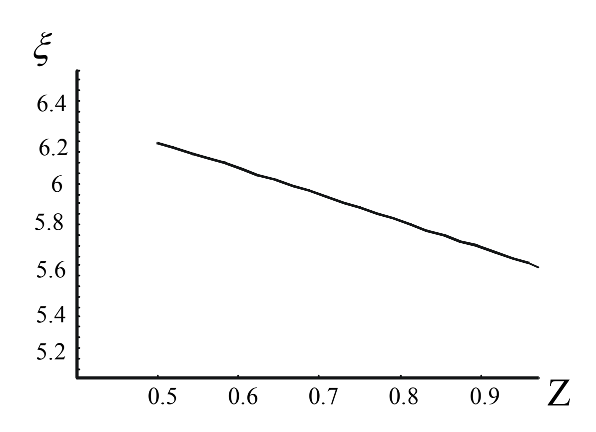


Рис. 3. Зависимость химического потенциала от степени диссоциации полярных групп молекул

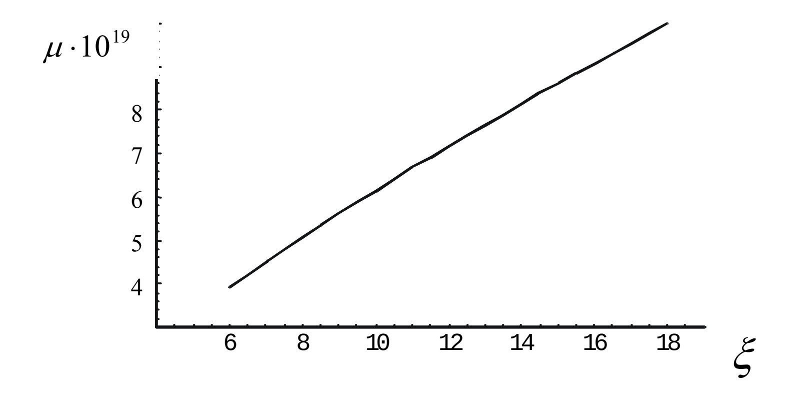


Рис. 4. Зависимость химического потенциала от числа CH_2-групп углеводородного хвоста молекулы

Результаты значений химического потенциала, полученные методом минимизации свободной энергии сравнивались с опытными калориметрическими результатами. При изменении структуры системы, когда

во втором состоянии $\mu_2 > \mu_1$, происходит поглощение количества теплоты, а в противоположном случае, при $\mu_2 < \mu_1$, количество теплоты выделяется. Изменение количества поглощенной или выделенной теплоты пропорционально изменению химического потенциала.

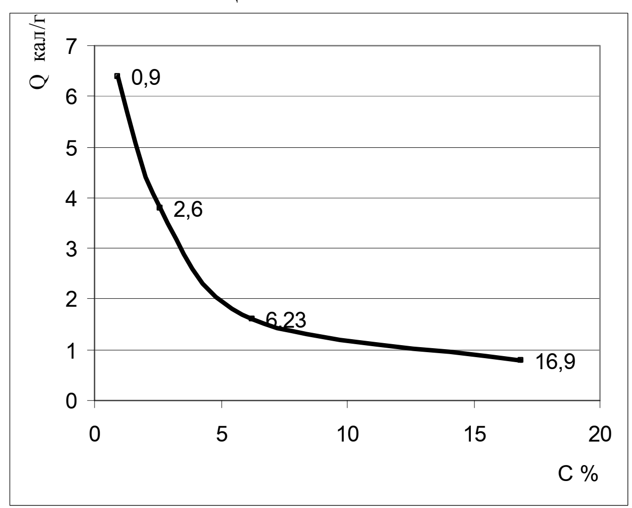


Рис.5. Зависимость количества выделенной теплоты Q от концентрации воды

На Рис.5 показана зависимость выделенного количества теплоты Q от концентрации вещества в воде (подобно зависимости от z). Параллельно росту z количество теплоты убывает по тому же закону. Так же изменяется и μ, т. е. $Q \sim \mu$, что вытекает из Рис. 3, полученного в результате минимизации свободной энергии.

Таким образом, формула (6) для химического потенциала, полученная методом минимизации свободной энергии, в общем случае описывает зависимость химического потенциала от степени диссоциации молекул и от числа ξ, входящих в группу CH_2 молекул. В частном случае можно определить вклад энергии в химический потенциал системы от одной группы CH_2. Результаты сходятся также с имеющимися в литературе известными табличными данными [6].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бадалян Г.Г., Шагинян А.А.* Биофизика, 33, 92–96 (1988)
2. *Закарян В.А., Карапетян В.Т., Бадалян Г.Г., Шагинян А.А.* Биофизика, 31, 37–42 (1986)
3. *Чер. А*., Сб. Лекций. Дубна: Щува, 412 (1987)
4. *Mardsen S.S., Bain J.W.* Colloid Chem, 3, 110–116 (1998)
5. *Ведеков А.А., Левченко Е.Б.* Успехи физических наук, 141, 3–54 (1983)
6. *Gallot B., Skoulios A.E.* Kolloid. Zh., 208, 37–84 (1968)

THE STUDY OF CHEMICAL POTENTIAL CHANGE OF AMPHIPHLE MOLECULE IN A MEMBRANE

Badalyan H.G.

It has been studied the dependence of chemical potential μ of amphiphilic molecule in bilayer on the degree of dissociation z of polar group of molecules and on the number of CH_2 - group ξ of hydrocarbon tail of the molecule by the method of minimization of the free energy of mesomorphic bilayer. It has been obtained, that chemical potential of the molecule decreases with the increase of z, i.e. heat extracting from system occurs and with the increase of ξ the chemical potential increase, i.e. the absorption takes place.

Key words: amphiphilic molecule, chemical potential, mesomorphic.

ՖՈՍՖՈԼԻՊԻԴԱՅԻՆ ԵՐԿՇԵՐՏՈՒՄ ԱՄՖԻՖԻԼ ՄՈԼԵԿՈՒԼԻ ՔԻՄԻԱԿԱՆ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼԻ ՓՈՓՈԽՈՒԹՅԱՆ ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐՈՒՄԸ

Բաղալյան Հ.Գ.

Ազատ էներգիայի մինիմիզացիայի միջոցով ուսումնասիրվել է ֆոսֆոլիպիդային երկշերտում ամֆիֆիլ մոլեկուլի μ քիմիական պոտենցիալի կախվածությունը բևեռային մոլեկուլների դիսոցիացիայի z աստիճանից և ածխաջրածնային պոչերում CH2 խմբերի ξ թվից: Ցույց է տրված, որ z մեծացման ժամանակ քիմիական պոտենցիալը փոքրանում է, տեղի է ունենում ջերմության առաքում համակարգից, իսկ ξ մեծացման դեպքում ընդհակառակը ավելանում է և տեղի ունի կլանում:

Поступила 29.01.2013 г.

УДК 547. 855

СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ БИС-ПИРИМИДИНИЛДИАМИНОВ

Г.Г. Данагулян[1, 2], А.К. Туманян[1, 2], К.К. Айрапетян[3]

[1]Российско-Армянский (Славянский) университет
[2]Научно-технологический центр органической и фармацевтической химии НАН РА
Институт органической химии
[3]Армянский государственный педагогический университет им. Х. Абовяна
e-mail: gdanag@email.com

Аннотация. Изучены реакции 4,6-диметил-2-хлорпиримидина с этилендиамином и гексаметилендиамином. Показано, что в условиях реакции, независимо от соотношения реагентов, образуются соответствующие бис-пиримидинилпроизводные. Аналогично, за счет обоих пиримидиновых колец протекает алкилирование избытком метилиодида. Взаимодействием пиримидиниламиноалканов со спиртовым раствором щелочи получены соответствующие ангидрооснования.
В спектре ЯМР ^{1}H иодида 2-(бензиламино)-1,4,6-триметилпиримидиния, зарегистрированном после добавления CD_3ONa, отмечен легко, количественно и избирательно протекающий осно́вный дейтерообмен протонов лишь С-метильных и аминной групп пиримидиниевой соли.
Строение полученных веществ подтверждено спектральными методами (ЯМР, масс-спектрометрия).
Ключевые слова: пиримидин, этилендиамин, гексаметилендиамин, иодид пиримидиния, ЯМР ^{1}H.

Замещенные бис-пиримидинилалканы являются хорошей синтетической платформой для получения гетероциклофанов, а также макроциклов, содержащих фрагменты гетероциклов [1, 2]. Сами бис-аддукты аминоазинов из-за наличия в их составе пиридиновых атомов азота и аминных групп могут оказаться перспективными лигандами для синтеза координационных соединений хелатного типа, моделирующих природные металлоферменты, а также в качестве электроактивных катализаторов и соединений для селективного извлечения редкоземельных металлов из растворов.

С целью последующего превращения в макроциклы на основе пиримидина взаимодействием 4, 6-диметил-2-хлорпиримидина (**1**) с этилендиамином и гексаметилендиамином нами осуществлен синтез бис-

пиримидиниламиноалканов. Показано, что, независимо от соотношения реагентов, реакция с хорошими выходами протекает за счет обеих аминных групп диаминов. Реакция бис-пиримидинилпроизводных с избытком метилиодида также приводит к алкилированию атомов азота обоих пиримидиновых колец, что подтверждено спектрами ЯМР ^{1}H синтезированных соединений.

Спектры ЯМР ^{1}H соединений **2a** и **2b** свидетельствуют о симметричном строение молекул. В спектрах соединений **3a** и **3b** алкилирование приводит к смещению сигналов всех протонов, связанных с пиримидиновыми кольцами в слабое поле. Прежде всего это относится к протонам 5-H и NH (соответственно, на 0.8-0.87 и 1.88-2.43 м. д.). Важно также заметить, что при алкилировании не наблюдается перехода амино-групп в иминную форму, о чем свидетельствует сохранение в спектрах солей **3a** и **3b** широкого сигнала протонов аминных групп.

В качестве контроля, позволяющего отметить переход молекулы в имино-форму мы осуществили реакцию иодида 2-бензиламино-1,4,6-триметилпиримидиния (**5**) со спиртовым раствором двукратного количества гидроксида калия, что привело к синтезу соответствующего ангидрооснования – N-[1,4,6-триметилпиримидин-2(1H)-илиден]бензилимина (**6**), который лишен возможности находиться в аминной форме. Отметим, что выделение ангидрооснований из пиримидиниевых солей ранее было описано с участием одного из авторов при изучении механизма рециклизации енаминовых перегруппировок (перегруппировок Коста-Сагитуллина) [3–5].

Образование ангидрооснования из соли **5** фиксируется в спектре ЯМР ^{1}H. В частности, в спектре ангидрооснования **6** отмечено исчезновение сигнала протона аминной группы, а также значительное, в сравнении с сигналом того же протона в иодиде **5** (7.01 м. д.), смещение сигнала протона 5-H в сильное поле (5.59 м. д.). Сигнал метиленовых протонов в спектре ангидрооснования **6** проявляется синглетом и претерпевает смещение в слабое поле (от 3.75 в соли **5**

до 4.47 м. д. в соединении **6**), тогда как сигналы протонов метильных групп смещаются в сильное поле (на 0.35-0.44 м. д.), что, по-видимому, объясняется исчезновением положительного заряда из пиримидиновых фрагментов молекулы.

Образование ангидрооснования, подобно описанному выше, нами отмечено и на примере бис-аддукта **3а**, при обработке последнего эквимольным количеством щелочи. В спектре ЯМР ^{1}Н выделенного ангидрооснования **7** отсутствует сигнал аминного протона, а также наблюдается смещение сигналов всех протонов в сильное поле. Обращает на себя внимание существенное (на 1.26 м.д.) перемещение в сильное поле сигнала пиримидиновых протонов 5-Н и 5`-Н.

3a —KOH, -KI→ **7**

В предыдущем сообщении [6] был описан изотопный обмен аминных и С-алкильных протонов, связанных с пиримидиновым кольцом. Та же закономерность нами отмечена при исследовании бензиламинопроизводного **5**. При действии на спиртовый раствор соли **5** в CD_3OD дейтерированным метилатом натрия (CD_3ONa) в спектре ЯМР ^{1}Н уже через 10 мин наблюдается уменьшение сигнала С-метильных групп, соответственно, на 53% и 90%, а через 24 часов в спектре ЯМР сигналы этих протонов и вовсе не фиксируются, что характеризует степень прошедшего дейтерообмена. Важно также отметить, что сигнал протона 5-Н отмечен в той же области, в которой наблюдались сигналы протонов 5-Н в ангидрооснованиях, что свидетельствует об образовании ангидрооснования также в процессе избирательного дейтерирования. Отметим, что при растворении в дейтерометаноле, даже без добавления CD_3ONa, в спектре соединения **5** исчезает сигнал протона аминной группы, а сигнал метиленовых протонов бензильного фрагмента переходит из дублета в синглет, что объясняется прошедшим дейтерообменом.

5 —CD_3OD→ —CD_3ONa→

Экспериментальная часть

Спектры ЯМР были получены в Центре исследования строения молекул НАН РА (программа US CRDF RESC 17-5), на приборе Varian «Mercury 300» с резонансной частотой 300,077 МГц на ядре атома водорода и 75,46 МГц на ядре ^{13}C. Температура образцов 303K. В качестве растворителя использован DMCO-d_6, стандарт ТМС. Масс-спектры зарегистрированы на спектрометре МК-1321 с прямым введением образца в ионный источник и при энергии ионизации 70 эВ. Для хроматографии в тонком слое использовали пластинки Silufol UV-254, проявляли парами иода и реактивом Эрлиха.

N^1, N^2-Бис(4,6-диметилпиримидин-2-ил)этан-1,2-диамин (2a). а) К раствору 0.3 *г* (0.005 *моля*) этилендиамина в 3 *мл* абс. этанола приливают раствор 1.43 *г* (0.01 *моля*) 4,6-диметил-2-хлорпиримидина (**1**) в 3 *мл* абс. этанола. Прозрачный раствор кипятят 8 *ч*. Образовавшийся осадок отфильтровывают, промывают на фильтре этанолом. После подщелачивания разбавленным водным раствором NaOH до pH 7.5-8.0 осадок отфильтровывают и получают 1.23 *г* (90%) белых кристаллов соединения **2a**, т. пл. 185-187 ^oC, R_f 0.6 (бензол-ацетон, 2:1).

б) К раствору 0.6 *г* (0.01 *моля*) этилендиамина в 5 *мл* абс. этанола приливают раствор 1.43 *г* (0.01 *моля*) 4,6-диметил-2-хлорпиримидина в 5 *мл* абс. этанола. Прозрачный раствор кипятят 8 *ч*. Образовавшийся осадок отфильтровывают, промывают на фильтре этанолом, подщелачивают разбавленным водным раствором NaOH до pH 7.5-8.0. Получают 1.1 *г* (79%) белых кристаллов **2a**, т. пл. 186-187 °C, R_f 0.6 (бензол-ацетон, 2:1).

Спектр ЯМР ^1H, δ, м.д. (*J*, Гц): 2.20 (12H, с, CH_3); 3.48-3.51 (4H, м, CH_2); 6.17 (2H, с, 5H и 5`H); 6.69 (2H, уш. т, *J*= 5.1, NH).

Спектр ЯМР ^{13}C, δ, м.д.: 23.2 (CH_3); 40.5 (CH_2); 108.0 (C_5); 161.95 (C_2); 165.9 ($\underline{C}$-CH_3).

Масс-спектр (m/z, $I_{отн.}$, %): 272 (M^+, 15), 149 (43), 148 (100), 147 (84), 137 (13), 136 (79), 135 (93),123 (73), 122 (12),107 (45), 106 (12).

Найдено, %: C 61.65; H 7.29; N 30.75. $C_{14}H_{20}N_6$. Вычислено, %: C 61.74; H 7.40; N 30.86.

N^1, N^6-Бис(4,6-диметилпиримидин-2-ил)гексан-1,6-диамин (2b). а) К раствору 1.16 *г* (0.01 *моля*) гексаметилендиамина в 3 *мл* этанола приливают раствор 2.85 *г* (0.02 *моля*) 4,6-диметил-2-хлорпиримидина в 3 *мл* этанола. Прозрачный раствор кипятят 8 *ч*. Образовавшийся осадок отфильтровывают, промывают на фильтре этанолом, далее подщелачивают до pH 7.5–8.0. Получают 1.9 *г* (58%) белых кристаллов бис-аддукта **2b**, т. пл. 125–128 °C, R_f 0.6 (бензол-ацетон, 1:1).

б) К раствору 2.32 *г* (0.02 *моля*) гексаметилендиамина в 3 *мл* этанола приливают раствор 2.85 *г* (0.02 *моля*) 4,6-диметил-2-хлорпиримидина в 3 *мл* этанола. Прозрачный раствор кипятят 8 *ч*. Образовавшийся осадок отфильтровывают и обрабатывают аналогично описанному выше. Получают 2.5 *г* (76%) белых кристаллов соединения **2b**, т. пл. 126-128 °C, R_f 0.6 (бензол-ацетон, 1:1).

Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д. (*J*, Гц): 1.37-1.45 (4H, м, CH_2); 1.51-1.60 (4H, м, CH_2); 2.19 (12H, с, 4xCH_3); 3.25-3.33 (4H, м, NH$\underline{CH_2}$); 6.09 (2H, уш. т, *J*= 5.4, NH), 6.16 (2H, с, 5-H и 5`-H).

Масс-спектр (m/z, *I*$_{отн.}$, %): 329 (M^++1, 11), 328 (M^+, 100), 206 (28), 205 (34), 204 (22), 193 (29), 191 (77), 178 (13),177 (12), 164 (19),150 (20), 149 (52), 137 (26), 136 (24), 135 (59), 122 (51).

Найдено, %: C 65.65; H 8.31; N 25.77. $C_{18}H_{28}N_6$. Вычислено, %: C 65.82; H 8.59; N 25.59.

Иодид N^1, N^2-бис(1`,4`,6`-триметилпиримидин-2`-илий)этан-1,2-диамина (3a). В запаянной ампуле при температуре 90-100 ^{o}C нагревают 8 *ч* смеси 1.9 *г* (0.007 *моля*) бис-пиримидинилдиаминоэтана (**2a**) с 11.4 *г* (5 *мл, 0.08 моля*) метилиодида. Образовавшийся осадок промывают эфиром и сушат на воздухе. Получают 2.7 *г* (70%) иодида **3a**, т. пл. 265 ^{o}C, R_f 0,05 (ацетон).

Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м. д.: 2.50 (6H, с, CH_3); 2.64 (6H, с, CH_3); 3.77 (6H, с, NCH_3); 3.85-3.89 (4H, м, NH$\underline{CH_2}$); 7.01 (2H, с, 5-H и 5`-H); 8.57 (2H, уш, NH).

Найдено, %: C 34.29; H 4.45. $C_{16}H_{26}I_2N_6$. Вычислено, %: C 34.55; H 4.71.

Иодид N^1, N^6-бис(1`,4`,6`-триметилпиримидин-2`-илий)гексан-1,6-диамина (3b). Аналогично вышеописанному, в запаянной ампуле при температуре 90–100 ^{o}C нагревают 8 *ч* смесь 0.2 *г* (0.0006 *моля*) бис-пиримидинилдиаминогексана **2b** и 2.28 *г* (*1 мл, 0.016 моля*) метилиодида. Образовавшийся осадок отфильтровывают, промывают эфиром и сушат на воздухе. Выход 0.22 *г* (60%), т. пл. 270 ^{o}C, R_f 0,05 (ацетон).

Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м. д. (*J*, Гц):1.38-1.46 (4H, м, CH_2); 1.60-1.71 (4H, м, CH_2); 2.48 (6H, с, CH_3); 2.59 (6H, с, CH_3); 3.50-3.59 (4H, м, NH$\underline{CH_2}$); 3.66 (6H, с, N^+-CH_3); 6.97 (2H, с, 5-H и 5`-H); 8.59 (2H, уш. т, *J* = 5.2, NH).

Найдено, %: C 39.05; H 5.39. $C_{20}H_{34}I_2N_6$. Вычислено, %: C 39.23; H 5.61.

2-Бензиламино-4,6-диметилпиримидин (4). К раствору 2.14 *г* (0.02 *моля*) бензиламина в 3 *мл* абс. этанола приливают раствор 1.43 *г* (0.01 *моля*) 4,6-диметил-2-хлорпиримидина в 5 *мл* абс. этанола. Прозрачный раствор кипятят 8 *ч*. Образовавшийся осадок отфильтровывают, промывают на фильтре этанолом. Получают 1.9 *г* (89%) белых кристаллов, т. пл. 105-107 °C, R_f 0.8 (бензол-ацетон, 3:1). Лит. данные: т. пл. 108.5–110.5 °C [7, 8].

Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д. (*J*, Гц): 2.21 (6H, с, 4,6-ди-CH_3); 4.55 (2H, д, *J*= 6.3, NH$\underline{CH_2}$); 6.22 (1H, с, 5-H); 6.70 (1H, т, *J*= 6.3, NH); 7.11-7.33 (5H, м, C_6H_5).

Спектр ЯМР ^{13}C, δ, м.д.: 23.2 (CH_3); 43.9 (CH_2); 108.3 (C_{ipso}); 125.8 (C_6H_5); 126.9 (C_6H_5); 127.5 (C_6H_5); 140.2; 161.8; 166.0.

Масс-спектр (m/z, *I*$_{отн.}$, %): 213 [M^+] (100), 212 (34), 137 (12), 108 (25), 107 (19), 106 (86), 91 (21).

Иодид 2-(бензиламино)-1,4,6-триметилпиримидиния (5). Смесь 2.13 *г* (0.01 *моля*) бензиламинопиримидина **4** и 9.12 *г* (4 *мл*, 0.064 *моля*) метилиодида нагревают в запаянной ампуле при температуре 90–100 ^{o}C 8 *ч*. Образовавшийся осадок промывают эфиром и сушат на воздухе. Получают 3.3 *г* (93%) иодида **5**, т. пл. 155–160 ^{o}C, R_f 0,05 (ацетон).

Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д. *J*, Гц (DMCO-d$_6$): 2.49 (3H, с, CH_3); 2.65 (3H, с, CH_3); 3.75 (3H, с, NCH_3); 4.78 (2H, д, *J* = 5.7, NH$\underline{CH_2}$); 7.01 (1H, с, 5-H); 7.20-7.34 (3H, м, C_6H_5); 7.38-7.43 (2H, м, C_6H_5); 9.25 (1H, т, *J* = 5.7, $\underline{NH}$CH$_2$).

Спектр ЯМР ^{13}C, δ, м. д.: 20.6 (CH_3); 24.3 (CH_3); 36.1 (CH_2); 45.1(NCH_3); 111.7(C_6H_5); 126.8 (C_6H_5); 127.5 (C_6H_5); 127.8 (C_6H_5); 137.1(C_2); 153.7 ($\underline{C}$-CH$_3$); 159.7 (C_5); 173.3 ($\underline{C}$-CH$_3$).

Найдено, %: C 47.09; H 5.37; N 11.75. $C_{14}H_{18}IN_3$. Вычислено, %: C 47.34; H 5.11; N 11.83.

Взаимодействие иодида 2-бензиламино-1,4,6-триметилпиримидиния (5) с CD_3ONa в дейтерированном метаноле-(d$_4$). В ампуле ЯМР готовят раствор нескольких *мг* иодида **5** в CD_3OD и регистрируют контрольный спектр ЯМР ^{1}H. Далее в ампулу прибавляют 2-3 капли заранее приготовленного раствора CD_3ONa в CD_3OD и контролируют динамику протекающего процесса дейтерообмена протонов в ампуле, путем регистрации изменений в спектре ЯМР ^{1}H в течение времени. Первый спектр регистрируется через 10 *мин* после добавления алкоголята натрия, последний через 24 *ч*.

Спектр ЯМР ^{1}H иодида 5, δ, м. д., (CD_3OD): 2.51 (3H, с, CH_3); 2.61 (3H, с, CH_3); 3.65 (3H, с, N-CH$_3$); 4.85 (2H, с, CH_2); 6.96 (1H, с, 5-H); 7.30-7.45 (5H, м, C_6H_5).

Спектр ЯМР ^{1}H иодида 5, δ, м. д., (CD_3ONa в CD_3OD) */через 10 мин после добавления CD_3ONa/*: 2.18 (1.4H, м, CH_3); 2.31 (0.3H, м, CH_3); 3.41 (3H, с, N-CH$_3$); 4.67 (2H, с, CH_2); 5.88 (1H, с, 5-H); 7.11-7.37 (5H, м, C_6H_5).

Спектр ЯМР ^{1}H иодида 5, δ, м. д., (CD_3ONa в CD_3OD) */через 24 ч после добавления CD_3ONa/*: 3.42 (3H, с, N-CH$_3$); 4.66 (2H, с, CH_2); 5.87 (1H, с, 5-H); 7.11-7.37 (5H, м, C_6H_5).

***Получение ангидрооснований из иодидов 3а и 5*.**

Взаимодействие иодида 2-бензиламино-1,4,6-триметилпиримидиния (5) со спиртовым раствором едкого кали. Получение N-(1,4,6-триметилпиримидин-2-илиден)бензилимина (6). К 0.36 *г* (1 *ммоля*) иодида **5** в 5 *мл* абсолютного спирта при перемешивании и температуре 0 °C добавляют 5 *мл* абсолютного спирта, содержащего 0.06 *г* (1 *ммоля*) 85%-ого гидроксида калия. Через 5 *мин* образовавшийся желтый осадок отфильтровывают, промывают на фильтре и сушат на воздухе. Получают 0.11 *г* (50%) ангидрооснования – N-(1,4,6-триметилпиримидин-2-илиден)-бензилимина **(6)**, R_f 0.19 (ацетон), т. пл. 185 °C (обугливается).

Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д. (DMCO-d$_6$): 2.10 (3H, с, CH_3); 2.21 (3H, с, CH_3); 3.36 (3H, с, NCH_3); 4.49 (2H, с, CH_2); 5.60 (1H, с, 5-H); 7.06-7.31 (3H, м, C_6H_5).

Найдено, %: C 74.09; H 7.35. $C_{14}H_{17}N_3$. Вычислено, %: C 73.98; H 7.54.

Взаимодействие иодида бис-пиримидиния 3а со спиртовым раствором едкого кали. Получение N^1, N^2-бис[1,4,6-триметилпиримидин-2(1H)-илиден]этан-1, 2-диамина (7). Аналогично описанному выше к 0.56 *г* (1 *ммоля*) иодида **3а** в 5 *мл* абсолютного спирта при перемешивании и температуре 0 °C добавляют 5 *мл* абсолютного спирта, содержащего 0.12 *г* (2 *ммоля*) 85%-ого

гидроксида калия. Через 5 *мин* образовавшийся желто-зеленный осадок отфильтровывают, промывают 2 *мл* холодного абс. этанола и сушат на воздухе. Получают 0.17 *г* (57%) ангидрооснования – N^1, N^2-бис[1,4,6-триметилпиримидин-2(1H)-илиден]этан-1,2-диамина **(7)**, R_f 0.24 (ацетон), т. пл. 175-178 °C (обугливается).

Спектр ЯМР ^{1}H, δ, м.д. *J*, Гц (DMCO-d$_6$): 2.12 (6H, с, CH_3); 2.25 (6H, с, CH_3); 3.38 (6H, с, NCH_3); 3.42 (4H, т, CH_2CH_2); 5.75 (2H, с, 5-H и 5`-H).

Найдено, %: C 63.75; H 8.31. $C_{16}H_{24}N_6$. Вычислено, %: C 63.97; H 8.05.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Semenov V.E., Krylova E.S., Galyametdinova I.V., Chernova A.V., Khalamov S.V., Latypov S.K., Reznik V.S.* Tetrahedron, 38, 7370–7378 (2011).
2. *Крылова Е.С., Семенов В.Э., Галяметдинова И.В., Акамсин В.Д., Шарафутдинова Д.Р., Резник В.С.* ЖОХ, 47, 741–747 (2011).
3. *Данагулян Г.Г., Киноян Ф.С., Тадевосян Д.А.* ХГС, № 2, 303–305 (2003).
4. *Данагулян Г.Г., Тадевосян Д.А.* ХГС, № 3, 463–466 (2006).
5. *Данагулян Г.Г., Тадевосян Д.А., Киноян Ф.С.* ХГС, N 6, 894–901 (2006).
6. *Туманян А. К.* Вестник РАУ, № 2, 42–47 (2012).
7. *Shirakawa K.* // Yakugaku Zasshi, 79, 1477–1483 (1959); C.A. 54, 11038 (1960); РЖХим. 5Ж226 (1961).
8. *Whitehead C.W., Traverso J.J.* J. Am. Chem. Soc., 82, 3971–3977 (1960).

ՏԵՂԱԿԱԼՎԱԾ ԲԻՍ-ՊԻՐԻՄԻԴԻՆԻԼԴԻԱՄԻՆՆԵՐԻ ՍԻՆԹԵԶ

Գ.Հ. Դանագուլյան, Ա.Կ. Թումանյան, Կ.Կ. Հայրապետյան

Հետազոտվել են 4,6-դիմեթիլ-2-քլորպիրիմիդինի ռեակցիաները էթիլենդիամինի և հեքսամեթիլենդիամինի հետ: Պարզվել է, որ ռեակցիայի պայմաններում, անկախ ռեագենտների հարաբերությունից, առաջանում են համապատասխան բիս-պիրիմիդինիլ ածանցյալները: Նմանապես պիրիմիդինային օղակի հաշվին է ընթանում նաև ալկիլացումը մեթիլյոդիդի ավելցուկի հետ:

Պիրիմիդինիլամինոածանցյալների և ալկալու սպիրտային լուծույթի փոխազդեցությամբ ստացվել են համապատասխան անհիդրոհիմքերը:

2-(Բենզիլամինո)-1,4,6-տրիմեթիլպիրիմիդինիումի յոդիդի ՄՄՌ ^{1}H սպեկտրում, գրանցված միջավայրում նատրիումի դեյտերամեթիլատի առկայության պայմաններում, նկատվել է պիրիմիդինիումային աղի C-մեթիլ- և

ամինախմբերի պրոտոնների՝ հեշտությամբ, քանակապես և ընտրողաբար ընթացող հիմնային դեյտերափոխանակում:

Ստացված բոլոր նյութերի կառուցվածքը հաստատվել է սպեկտրալ եղանակներով (ՄՄՌ և մասսպեկտրաչափական):

SYNTHESIS OF SUBSTITUTED BIS-PYRIMIDINYLDIAMINES

G.G. Danagulyan[1, 2], A.K. Tumanyan[1, 2], K.K. Hayrapetyan[3]

The reactions of 4,6-dimethyl-2-chloropyrimidine with ethylenediamine and hexamethylenediamine were studied. It was shown that the reactions resulted in the corresponding bis-pyrimidinyl derivatives irrespective of the reagents ratio. Similarly, alkylation proceeds by the excess of methyl iodide at the expense of two pyrimidine rings.

The corresponding anhydro bases are formed by interaction of pyrimidinylaminoalkanes with alcoholic solution of alkali.

^{1}H NMR spectrum of 2-(benzylamino)-1,4,6-trimethylpyrimidinium iodide, registered after addition of CD_3ONa, revealed easily, quantitatively and selectively proceeding base deuterium exchange of protons of only C-methyl and amine groups of pyrimidinium salt.

Structures of the obtained compounds were confirmed by spectral methods (NMR, mass-spectroscopy).

Key words: pyrimidine, ethylenediamine, hexamethylenediamine, pyramidnium iodide, ^{1}H NMR.

Поступила 20.02.2013 г.

УДК 574.814.5

АКТИВНОСТЬ ФЕРМЕНТОВ АНТИОКСИДАНТНОЙ СИСТЕМЫ ЛИСТЬЕВ ЛАВРА ИЗ РАЗЛИЧНЫХ РЕГИОНОВ ЮЖНОГО КАВКАЗА

Г.Р. Вардапетян, С.Г. Тирацуян, М.Л. Рухкян

Российско-Армянский (Славянский) университет
hvardapetyan@mail.ru

Аннотация. Исследовано содержание хлорофиллов и каротиноидов в листьях *Laurus nobilis* L., собранных в районе города Ноемберян, Армения (L. $nobilis_{\mathbf{A}}$) и в районе города Зугдиди, Грузия (L. $nobilis_{\mathbf{G}}$). Показано, что содержание всех пигментов у *L.* $nobilis_{G}$ в 1,5 и более раз превышает их содержание в *L.* $Nobilis_{A}$, а соотношение хлорофиллов *a* и *b* ($Хлор_{\mathbf{A}}/Хлор_{\mathbf{B}}$) также является показателем хроматической адаптации и равно 1,61 и 1,53 для *L.* $nobilis_{G}$ и *L.* $Nobilis_{A}$, соответственно. Выявлено, что в процессе адаптации *L.* $nobilis_{A}$ происходит как уменьшение содержания основных пигментов, так и снижение активности основных ферментов антиоксидантной системы. Изменения в содержании пигментов и активности ключевых ферментов антиоксидантной защиты коррелируют с уменьшением синтеза вторичных метаболитов.

Ключевые слова: *Laurus nobilis* L., ферменты, белок, хлорофилл, относительная влажность

Флавоноиды являются вторичными метаболитами растительного происхождения, представляющими обширный класс низкомолекулярных полифенолов. Они обладают широким спектром биологического действия, включающим антибактериальное, антивиральное, антигрибковое, защищают от УФ-облучения, модифицируют ферментативные реакции. Флавоноиды проявляют иммуномодулирующую и противо-воспалительную, анти-астматическую, антигистаминовую, противоопухолевую, гепатопротекторную и т.д. активности. Считается, что в основе большей части физиологического действия фенольных соединений лежат их антиоксидантные свойства, заключающиеся в способности реагировать со свободорадикальными соединениями, образующимися в условиях окислительного стресса.

Главную роль в защите от кислородных интермедиантов играют ферменты, способные обезвреживать супероксидные радикалы и перекисные соединения в клетках, например: супероксиддисмутаза (СОД), каталаза и пероксидазы [1]. Абиотические и биотические стрессы приводят к временному сдвигу тканевого баланса антиоксидантов и про-оксидантов в сторону последних. Однако в настоящее время нет целостного представления как о влиянии различных неблагоприятных факторов внешней среды на метаболизм белков и, в частности, ферментов-антиоксидантов в клетках растений, так и механизмах компенсации повреждений, вызванных этими факторами. Для ферментов антиоксидантной защиты характерно согласованное действие. Например, такие ферменты-антиоксиданты, как СОД, каталаза и пероксидазы работают, как правило, в комплексе. Ключевым ферментом этого мультиферментного антиоксидантного комплекса является СОД, катализирующая лимитирующую стадию процесса превращения супероксидного радикала в другие активные формы кислорода. Данные литературы [2, 3, 4, 5] показывают, что при высоко- и низкотемпературном шоках в клетках растений происходит уменьшение содержания и снижение активности СОД и каталазы. Поэтому воздействие различных температур на растительный организм существенно смещает равновесие прооксиданты/антиоксиданты, что приводит к взаимодействию активных форм кислорода с биомолекулами и различными клеточными структурами.

Возникающие при этом в большом количестве, например, продукты перекисного окисления липидов и др., могут выступать первичными медиаторами стрессового воздействия температурного фактора и индукторами соответствующих защитных механизмов в растительных клетках.

Лавр благородный (Laurus nobilis L.) – это вечнозеленый кустарник, растущий в Средиземноморском регионе. Листья лавра благородного как лекарственного растения *(L. nobilis L.)* используются при лечении ревматизма, кожных сыпях, а также боли в ухе, используются как ветрогонное, потогонное, стимулирующее, рвотное средство, понижающее уровень холестерола в крови и т.д. На Кавказе лавр широко культивируется в регионах с морским климатом – таких, как прибрежные районы Грузии. В последние годы лавр стал культивироваться в Армении в Тавушской области (Ноемберян), которая граничит с Грузией. Однако изменение среды культивирования (климат, почва, высота над уровнем моря) приводит к стрессу, что не может не отражаться на количественном и качественном составе вторичных метаболитов, ответственных за лечебные свойства лавра. Целью настоящей работы являлось исследование изменений, происходящих в составе вторичных метаболитов и в активности ферментов антиоксидантной системы лавра в процессе адаптации к новым гео-климатическим условиям.

Материал и методы

В экспериментах использовался (Laurus nobilis) L из Ноемберянского р-на Армении *(L. nobilis$_A$)* и Зугдидского р-на Грузии *(L. nobilis$_G$)*, репродукции 2012г. Листья предварительно стерилизовали в 1% (V/V) гипохлорида натрия, сушили до 10% влажности, замораживали и хранили при – 20°C для анализов.

Определение относительной влажности листьев

Относительную влажность листьев (ОВЛ) оценивали по методу [6]. Для этого взвешивали 4–6 свежих листьев, добавляли дистиллированную воду и оставляли в течение 20 ч при температуре +4°C, затем повторно взвешивали набухшие листья. После этого их сушили при температуре 65–70°C в течение 48 ч и определяли вес сухих листьев. ОВЛ рассчитывали по следующей формуле:

ОВЛ = [(сырой вес – сухой вес) / (набухший вес – сухой вес)] ×100 (%)

Определение содержания хлорофилла в листьях

Хлорофилл экстрагировали 80% ацетоном в течение 24 часов и после центрифугирования при 13000 об/мин измеряли поглощение надосадка на спектрофотометре (UV/Vis JENWAY 6405). Содержание хлорофилла А (Хл$_А$) определяли при длине волны 663 нм, Б – при 645 нм (Хл$_Б$), общее содержание хлорофилла при 652 нм, а содержание β-каротиноидов (β-Кар) – при 450 нм [7].

Для каждой длины волны λ поглощение $A_λ$ экстракта определяли по формуле:

$$A_λ = (C_{Хл\text{-}А} \times ε_{Хл\text{-}А,λ}) + (C_{Хл\text{-}Б} \times ε_{Хл\text{-}Б,λ}) + (C_{β\text{-}Кар} \times ε_{β\text{-}Кар,λ})$$

Таким образом, если известны молярные коэффициенты экстинкции (ε) трех пигментов, то могут быть определены концентрациях всех трех пигментов в экстракте. Коэффициенты экстинкции в 80% ацетоне, на основании которых рассчитывали содержание этих пигментов, равны (86,3 мМ$^{-1}$ см$^{-1}$ при 663 нм для Хл$_А$, 134,14 мМ$^{-1}$см$^{-1}$ при 646 нм для Хл$_Б$ и 140 мМ$^{-1}$ см$^{-1}$ при 454 нм для β-Кар), соответственно.

Содержание пигментов (мг/г сухого веса) рассчитывают по формулам:

$$C_A = 12,21 \times D_{663} – 2,81 \times D_{646}$$

$$C_B = 20.13 \times D_{646} – 5.03 \times D_{663}$$

$$C_{КАР} = (1000 \times D_{470} - 3.27 \times C_A - 100 \times C_B)/229,$$

где C_A, C_B, и $C_{КАР}$ – концентрация хлорофиллов a, b и каротиноидов в мг/л.

D – оптическая плотность при длине волны в формуле.

Затем вычисляют содержание пигментов (А) в растительном материале в мг/г сырой массы:

A=VC/ 1000P, где С – концентрация пигментов в мг/л;

V – объем вытяжки в мл (25 мл);

P – навеска растительного материала в граммах (0,1–0,2 г) и содержание пигмента в % на сырую массу по формуле: % пигмента = A/10, где A – содержание пигмента в 1 грамме [20].

Содержание хлорофилла в листьях растений составляет в среднем около 0,3 % сырой массы (0,1–0,7 %). При расчете на 1 $дм^2$ листовой поверхности количество хлорофилла варьирует в пределах 0,7–0,8 мг. Количество каротиноидов в листьях примерно в 3–8 раз меньше, чем хлорофилла.

Определение растворимого белка и активности ферментов.

Для измерения активности супероксиддисмутазы (СОД), 1 г измельченных листьев гомогенизировали в 5 мл 0,05 M Na фосфатного буфера (pH 7,8), содержащего 1 мМ ЭДТА и 0,2 г (1× 8, 200×400 меш) Dowex. Определение активности СОД проводили спектрофотометрически при 560 нм по методу Бекампа и Фридовича [8], который основан на уменьшении оптической плотности p-нитро-тетразолия хлорида. В качестве единицы активности СОД принимали количество фермента, необходимое для 50% ингибирования скорости уменьшении оптической плотности p-нитро-тетразолия хлорида. Реакционная смесь содержала 50 мМ Na фосфатного буфера (pH 7,8), 33 µM p-нитро-тетразолия хлорида, 10 мМ L-метионина, 0,66 мМ ЭДТА и 0,0033 мМ рибофлавина.

Для измерения активности пероксидазы 1 г измельченных листьев гомогенизировали в 3 мл 0,05 M трис-глициновом буфере (pH 8,3), содержащий 17% сахарозы и 0,2 г г (1× 8, 200×400 меш) Dowex. Активность пероксидазы определяли по методу [9]. Активность измеряли по возрастанию оптической плотности при 465 нм, происходящего за счет образования окисленной формы диаминобензидин-тетрагидрохлорид дигидрата. Реакционная смесь содержала диаминобензидин-тетрагидрохлорид и 0,6% H_2O_2. Активнось фермента определяли в μM $мл^{-1}$ утилизированного H_2O_2 в $мин^{-1}$.

Для измерения активности каталазы 1 г листьев гомогенизировали в 3 мл 0,05 M Na фосфатного буфера (pH 7,6), содержащего 1 мМ ЭДТА и 0,2 г (1× 8, 200×400 меш) Dowex. Активность каталазы (КАТ) определяли по методу Бергмайера [10], основанному на утилизации H_2O_2, измерением уменьшения оптической плотности при 240 нм. Реакционная смесь содержала 0,05M

фосфатного буфера (pH 7,0), 1 мМ EDTA с и 3% H_2O_2. Активность фермента определяли в μM утилизированного H_2O_2 мин$^{-1}$.

Гомогенизации проводили в ледяной бане. Гомогенаты центрифугировали при 13,000g в течение 40 мин при температуре +4°С. Надосадки использовали для определения ферментативной активности и содержания белка.

Определение содержания белка

Общее содержание растворимых белков определяли по Бредфорду [11], используя в качестве стандарта БСА. Определение содержания белка основано на сдвиге спектра поглощения красителя кумасси ярко-голубого (CBB G-250) в сторону 595 нм при связывании его с белком.

Результаты и обсуждение

На первом этапе нами исследовалось общее содержание пигментов в листьях *L. nobilis$_G$* и *L. Nobilis$_A$*. На Рис.1 приведены спектры поглощения ацетоновых экстрактов листьев *L. nobilis$_G$* и *L. Nobilis$_A$*.

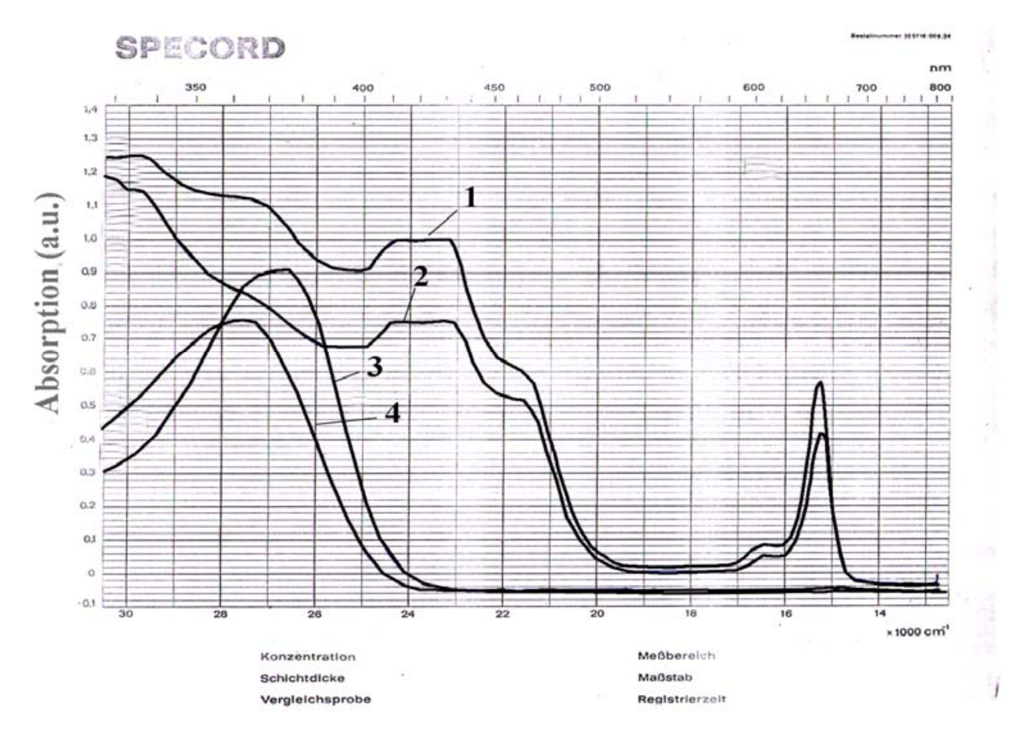


Рис.1. Спектры поглощения ацетонового экстракта *L. nobilis$_G$* (1) и *L. Nobilis$_A$*. (2), а также растворов кверцетина (3) и рутина (4).

Как видно из рисунка, общее содержание пигментов в 1г листьев *L. nobilis*$_G$ значительно превышает аналогичный показатель *L. Nobilis*$_A$. Известно, что качественный и количественный состав пигментов является (в физиологическом смысле) показателем приспособленности растения к условиям окружающей среды. С этой целью нами проводилось определение содержания отдельных пигментов (хлорофиллов и каротиноидов) в экстрактах *L. nobilis*$_G$ и *L. Nobilis*$_A$.

Полученные результаты обобщены и представлены в Таблице1.

Таблица 1. Содержание пигментов в экстрактах листьев *L. nobilis*$_G$ и *L. Nobilis*$_A$.

пигмент	ε мМ$^{-1}$см$^{-1}$	*L. nobilis*$_A$			*L. nobilis*$_G$		
		ОП	С (мМ)	С (мг/г)	ОП	С (мМ)	С (мг/г)
Хл$_A$ (λ_{663})	86,3	0,615	7.1	6,49	0,979	11.3	10,36875
Хл$_B$ (λ_{645})	134,14	0,364	2.7	4,23	0,564	4.2	6,42895
Кар (λ_{470})	140	0,935	6.7	2,14	1,5	10.7	3,59428

Известно, что количество хлорофилла и каротиноидов, приходящееся на единицу веса, различно у растений, адаптированных к разным условиям. Как видно из Таблицы 1, содержание всех пигментов у *L. nobilis*$_G$ в 1,5 и более раз превышает их содержание в *L. Nobilis*$_A$. Однако при этом соотношение (Хл$_A$+Хл$_B$)/Кар у *L. nobilis*$_G$ и *L. Nobilis*$_A$ составляет 4,67 и 5,00, соответственно. Это указывает на относительно большее содержание каротиноидов в *L. nobilis*$_G$. Соотношение хлорофиллов *a* и *b* (Хл$_A$/Хр$_B$) также является показателем хроматической адаптации и равно 1,61 и 1,53 для *L. nobilis*$_G$ и *L. Nobilis*$_A$, соответственно (Таблица 1). Таким образом, в процессе адаптации происходят количественные изменения в пигментах *L. nobilis*$_G$ и *L. Nobilis*$_A$, что может отражаться на их метаболической потенции и антиоксидантных свойствах.

Одной из первых неспецифических ответных реакций растений на биотический и абиотический стрессы, в том числе и на высоко- и низкотемпературные шоки, является генерация АФК. Избыточное образование АФК может происходить в митохондриях и хлоропластах (при переносе электронов по электронтранспортным цепям), в эндоплазматическом ретикулуме (при работе микросомальных монооксигеназ), в пероксисомах (генерация перекиси водорода). Интенсификация генерации прооксидантов происходит также при активации оксидаз, локализованных в плазматической мембране и

цитоплазме и, возможно, связанных с рецепторами, передающими клетке внеклеточные сигналы [5, 12, 13].

Что касается вторичного стресса (воздействие высоких или низких температур), то он сопровождался снижением скорости биосинтеза СОД и каталазы. Известно, что растительная ткань реагирует на воздействие различных неблагоприятных внешних факторов среды, в том числе различных биологических и химических агентов, сходным образом, что свидетельствует об универсальности некоторых защитных реакций живых организмов на воздействие окружающей их среды [9, 12]. В частности, супероксидные радикалы являются одним из факторов лигнификации для создания механического барьера на пути инфекции, а также служат эндогенным индуктором синтеза фитоалексинов, этилена и др. Установленное рядом исследователей [14] повышение активности и содержания пероксидазы при температурных шоках, по-видимому, связано с тем, что пероксидазам растений свойственна уникальная метаболическая полифункциональность [15, 16, 17]. Так как, помимо выполнения своей основной функции – защиты клеток от токсичных перекисных радикалов, пероксидаза принимает участие во многих других процессах, таких как полимеризация монолигнолов при образовании лигнинов [18, 19, 20, 21] и оксисление кониферилового спирта при образовании лигнанов [22, 23]. Установлено, что пероксидазы могут участвовать в защитных механизмах при заражении растений патогенами, так как образующиеся при окислении фенолов токсичные продукты ингибируют рост и развитие возбудителя болезней у растений.

В Таблице 2 приведены содержание флавоноидов и активность некоторых ферментов антиоксидантной системы *L. nobilis*$_{\boldsymbol{G}}$ и *L. Nobilis*$_{\boldsymbol{A}}$.

Таблица 2. Содержание флавоноидов и активность ферментов антиоксидантной системы *L. nobilis*$_{\boldsymbol{G}}$ и *L. Nobilis*$_{\boldsymbol{A}}$.

Фермент	*L. nobilis*$_{\boldsymbol{G}}$	*L. Nobilis*$_{A}$.	*L. Nobilis*$_{A}$ /*L. nobilis*$_{\boldsymbol{G}}$
	Ед.акт./мг белка	Ед.акт./мг белка	
СОД	147.6	120,6 ± 0,6	0,81
КАТ	12.8	8	0,66
ПО	20,44 ± 2,28	11	0,54
Содержание флавоноидов (мг/г)	40.1 ± 0.45	26.6 ± 0.1	0,65

Как видно из таблицы 2, в процессе адаптации происходит значительное уменьшение активности всех исследованных ферментов. Однако если активность СОД уменьшается на 19%, то активность каталазы и пероксидазы уменьшаются на 36% и 46 %, соответственно.

Таким образом, из наших результатов следует, что в процессе адаптации происходит уменьшение как содержания основных пигментов, так и активности ферментов антиоксидантной системы *L. nobilis*$_A$. Исследованные биохимические показатели прямо коррелируются с общим содержанием пигментов в листьях и хлорофилла, в частности. Изменения в содержании пигментов и активности ключевых ферментов антиоксидантной защиты приводят к уменьшению синтеза вторичных метаболитов [24], что может отражаться на лечебных свойствах *L. nobilis*$_A$.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Меньщикова Е.Б., Зенков Н.К.* Антиоксиданты и ингибиторы радикальных окислительных процессов // Успехи совр. биологии. 113. №4. 442–455 (1993).
2. *Willekens H., Inze D., Van Montagu M., Van Camp W.* Catalase in plants // Molecular Breeding. L, 207–228 (1995).
3. *Foyer C.H., Lopez-Delgado H., Dat J.F., Scott I.M.* Hydrogen peroxide- and glutathione-associated mechanisms of acclimatory stress tolerance and signaling // Physiol. Plant. 100, 241–254 (1997).
4. *Scandalios J.G.* Molecular genetics of superoxide dismutase in plants //Oxidative stress and the Molecular Biology of Antioxidant Defenses. Cold Spring Harbor Laboratory Press, Cold Spring Harbor. N.-Y., 527–568 (1997).
5. *Dat J.F., Lopez-Delgado H., Foyer Ch.H., Scott I.M.* Parallel changes in H202 and catalase during thermotolerance induced by salicylic acid or heat accumulation in mustard seedlings // Plant Physiol.. 116, 1351–1357 (1998).
6. *Ekanayake, I.J., De Datta S.K., Steponkus P.L.* Effect ofwater deficit stress on diffusive resistance, transpiration, and spikelet desiccation of rice (Oryza sativa L.). // Ann. Bot. (Lond.) 72:73–80, (1993).
7. *Lichtenthaler H.K.* Chlorophills and karotenoids: Pigments of photosynthetic biomembranes //*Method. Enzymol.*, 148, 350–382 (1987).
8. *Beauchamp C., Fridovich I.* Isozymes of superoxide dismutase from wheat germ. //Anal. Biochem., 44, 276–287 (1971)
9. *Андреева В.А.* Фермент пероксидаза. Участие в защитном механизме растений. М.: Наука., 1988, 129 с.
10. *Bergmeyer N.* Methoden der Enzymatischen Analyse,// Akademie Verlag,, 1, 636–562 (1970).
11. *Bradford M.* New method for protein quantification //Anal. Biochem., 72, 248–250 (1976).
12. *Baker C.J., Orlandi E.W.* Active oxygen species in plant pathogenesis // Ann. Rev. Phytopathol. 33. 299-321 (1995).
13. *Bowler C., Montagu M.V., Inze D.* Superoxide dismutase and stress tolerance // Ann. Rev. Plant Physiol. Plant Mol. Biol., 43. 83–116 (1992).
14. *Аверьянов А.А.* Активные формы кислорода и иммунитет растений // Успехи совр. биол.. 111 (5), 722–737 (1991).

15. *Vardapetyan H.R., Hovhannisyan A.A., Tiratsuyan S.G., Kabasakalyan E.E., Martirosyan A.S.* Substrate specificity of peroxidases, //IAELPS Regional Issue, 10 (5) 161–164 (2005).

16. *Marjamaa K, Kukkola E, Lundell T, Karhunen P, Saranpää P*, Farstedt KV Monolignol oxidation by xylem peroxidase isoforms of Norway spruce (*Picea abies*) and silver birch *(*Betula pendula*)*.Tree Physiol 26*:* 605–611 (2006).

17. *Gómez Ros LV, Gabaldón C, Pomar F, Merino F, Pedreño MA, Ros Barceló A*. Structural motifs of syringyl peroxidases predate not only the gymnosperm-angiosperm divergence but also the radiation of tracheophytes*. //*New Phytol. 173, 63–78 (2007).

18. Ralph J, Landucci LL, NMR of lignins*.* In Heitner C*,* Dimmel DR*,* eds*,* Lignins*. //* Marcel Dekker*,* New York, 137–234 (2010).

19. *Ralph S.A, Christensen J.H. et al*. Lignins: natural polymers from oxidative coupling of 4-hydroxyphenylpropanoids*. //*Phytochem Rev 3, 29–60 (2004).

20. *Vanholme R, Demedts B., . Morreel K, Ralph J., Boerjan W*. Lignin Biosynthesis and Structure // Plant Physiol.153, 895-905 (2010).

21. *Hatfield R, Ralph J, Grabber J.H*. A potential role for sinapyl *p*-coumarate as a radical transfer mechanism in grass lignin formation*.//* Planta, 228, 919–928 (2008).

22. *Saleem M., Kim H. J., Ali M. S., Lee Y. S.* An update on bioactive plant lignans // Natural Product Reports, 22, №6, 696–716 (2005).

23. *Silva M. L.; Martins C. H., Lucarini R.; Sato D. N., Pavanb F. R., Freitas N. H., et al*. Antimycobacterial activity of natural and semi-synthetic lignans. // Zeitschrift Fur Naturforschung Section C-a Journal of Biosciences, 64, №11–12, 779–784 (2009).

24. *Zenk M.N*. Enzymatic synthsis of alkaloids via plant cell cultures //11 Int. Conf. Chem. and biotechnol. Biologically act. Natur. Prod. Sofia. L, 213–232 (1981).

ANTIOXIDANT ENZYME ACTIVITY OF *LAURUS NOBILIS L.* LEAVES FROM TWO DIFFERENT REGIONS OF THE SOUTH CAUCASUS

Vardapetyan H.R., Tiratsuyan S.G., Rukhkyan M.L.

The content of chlorophylls and carotenoids was examined in the leaves of *Laurus nobilis L*. collected on the outskirts of the towns of Noyemberyan, Armenia ($L.nobilis_{A}$) and Zugdidi, Georgia ($L.nobilis_{G}$). It was shown that the content of all pigments in $L.\ nobilis_{G}$ exceeded by 1.5 times or more the content of pigments in $L.nobilis_{A}$, whereas the ratio of chlorophylls *a* and *b* ($Хл_{A}$ and $Хл_{B}$, respectively) varied from 1.61 to 1.53 for $L.\ nobilis_{G}$ and $L.nobilis_{A}$, respectively. It was identified that in the process of adaptation there is both a decrease in the content of the main pigments and a drop in the activity of the main of the antioxidation system of $L.nobilis_{A}$. The changes in both the content of pigments and the activity of key enzymes of antioxidant defence lead to a decrease in the synthesis of secondary metabolites.

Keywords: *Laurus nobilis* L., enzymes, protein, chlorophyll, relative humidity.

ՀԱՐԱՎԱՅԻՆ ԿՈՎԿԱՍԻ ՏԱՐԲԵՐ ՄԱՐԶԵՐՈՒՄ ԱՃՈՂ ԴԱՓՆՈՒ ՏԵՐԵՎՆԵՐԻ ՀԱԿԱՕՔՍԻԴԻՉ ՀԱՄԱԿԱՐԳԻ ՖԵՐՄԵՆՏՆԵՐԻ ԱԿՏԻՎՈՒԹՅՈՒՆ:

Վարդապետյան Հ.Ռ., Տիրացույան Ս.Գ., Ռուխկյան Մ.Լ.

Հետազոտված է քլորոֆիլների և կարոտինոիդների պարունակությունը, Հայաստանի Հանրապետության, Նոյեմբերյան քաղաքի (L. $nobilis_A$) շրջակայքում և Վրաստանի Հանրապետության, Զուգդիդի քաղաքի շրջակայքում (L. $nobilis_G$) հավաքված *Laurus nobilis* L.-ի տերևներում: Բոլոր պիգմենտների պարունակությունը *L.* $nobilis_G$ – ում, 1,5 և ավելի անգամ գերազանցում է *L.* $Nobilis_A$ – ում նույն պիգմենտների պարունակությանը, իսկ a և b քլորոֆիլների հարաբերակցությունը (Хл$_A$ և Хл$_B$, համապատասխանաբար), փոխվում է 1,61 – ից մինչը 1,53 *L.* $nobilis_G$ – ի և *L.* $Nobilis_A$ – ի համար համապատասխանաբար: Բացահայտված է, որ *L.* $Nobilis_A$ – ի հարմարվողության ընթացքում, տեղի է ունենում ինչպես հիմնական պիգմենտների պարունակության կրճատում, այնպես էլ հակաօքսիդիչ համակարգի հիմնական ֆերմենտների ակտիվության նվազում: Հակաօքսիդիչ պաշտպանության համակարգի պիգմենտների պարունակության և հիմնական ֆերմենտների ակտիվության փոփոխությունները, բերում են երկրորդական նյութափոխանակիչների գոյացման նվազեցմանը:

Поступила 07.02.2013 г.

УДК 577.32

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОДОФИЛЛОТОКСИНА И ЕГО ПОЛУСИНТЕТИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ С ДНК

Л.С. Унанян

Российско-Армянский (Славянский) университет
lhunanyan@mail.ru

Аннотация. Данная работа посвящена изучению прямого взаимодействия подофиллотоксина, этопозида и тенипозида с ДНК, используя метод абсорбционной спектроскопии и метода молекулярной динамики. Методом молекулярной динамики выявлены возможные сайты связывания. Двумя методами определены константы связывания и число пар оснований на ДНК, с которыми связывается одна молекула лиганда. Проведен сравнительный анализ полученных результатов.

Ключевые слова: ДНК, метод молекулярной динамики, константа связывания, число мест связывания.

Введение

Известно, что подофиллотоксин (NSC 24818) (Птокс) и его полусинтетические производные, в частности, этопозид (VP-16-213) (Этоп) и тенипозид (VM-26) (Тен), обладают биологической активностью и используются как противоопухолевые препараты (Рис. 1) [1–3]. Надо отметить, что Птокс имеет высокую степень цитотоксичности, в то время как Этоп и Тен менее токсичны [4].

При взаимодействии указанных соединений с клетками-мишенями типы и механизмы взаимодействия различны [5–6].

Кроме основных типов взаимодействия, описанных в литературе, имеются также данные о возможном прямом взаимодействии этих соединений с генетическим материалом клетки, в частности, с ДНК [1].

В настоящей работе рассматривается прямое взаимодействие этих соединений с ДНК, осуществленное экспериментальным путем и методом молекулярной динамики (ММД).

Рис. 1. Химическая структура лигнанов.

Материалы и методы

Приготовление комплексов (три в одном)

Комплексы приготовляли добавлением предварительно растворенного в метаноле Птокс, Этоп, Тен к раствору полимерной (10–15 тысяч пар нуклеотидов, “Sigma”) ДНК в 0,01 М фосфатном буфере, pH 7,0, в молярных соотношениях Птокс, Этоп, Тен. /ДНК = 0,125; 0,25; 0,5 и 1,0. Конечная концентрация метанола в комплексе не превышала 2,5%. В разработанной системе все три свободно растворяются в широком спектре концентраций в Na-фосфатном буфере, что позволяет проводить исследования комплексов в водной среде.

Обычно экспериментальные кривые связывания лигандов с ДНК сопоставляются с изотермой Крозерса-Гурского [7-9], которая описывет изотерму связывания при произвольном заполнении. Однако во многих экспериментах, в частности, и в наших экспериментах, реализуется случай малых заполнений ДНК. В этих случаях экспериментальные данные удобно описать линейной изотермой, которая имеет вид [10]:

$$\frac{r}{C_f} = K(1-(2n-1)r), \qquad (1)$$

где r – число лигандов, приходящее на одну пару оснований; c_f – концентрация лигандов в растворе; K – константа связывания; n – число пар оснований, с которыми связывается одна молекула лиганда. Сопоставив формулу (1) с экспериментальными данными, можно определить K и n. Для получения r/C_f и r, из спектров поглощения комплексов определялась концентрация не связанного лиганда (C_f) с помощью уравнения:

$$C_f = \frac{C_0\left(A - A_\infty\right)}{A_0 - A_\infty}, \qquad (2)$$

где A – поглощение комплекса при данной концентрации лиганда, A_0 и A_∞ – поглощение полностью свободного и связанного лигандов, где $C_0 = C_f + C_b$ – суммарная концентрация лигандов в растворе, $r = C_b / C_p$, C_b – концентрация связанного лиганда, C_p – концентрация фосфатных групп нуклеотида.

Создание компьютерной модели и молекулярное моделирование

При создании моделей были предусмотрены все параметры для низкомолекулярных соединений, получены силовые поля и сгенерированы топологические файлы всех трех молекул с использованием разных программ по биомоделированию [11–15].

Для молекулярного моделирования была использована модель ДНК, размещенная на базе данных RCSB [16] со следующей последовательностью:

PDB ACACTACAATGTTGCAAT
PDB 2 10 18

Для проведения компьютерного эксперимента было создано пространство додекаэдерного типа с диаметром 144.3 A^0, с длиной ребра 51.48 A^0 и с объемом 1045.49 нм^3, количество воды и ионов составило 13592 мол.

Продолжительность времени комплексирования – 40 нс., процедура МД протекала с временным шагом $\Delta t = 2$ фс при постоянной температуре T= 300 K и давлением в 1 атм.

Координаты всех атомов записывались каждые 2 пс. Расчетные критерии радиуса взаимодействия рассчитывались по стандарту: для кулоновских взаимодействий – 0.9 нм, ван-дер-ваальсовских взаимодействий – 1.4 нм [17].

Для расчета энергии комплексообразования этих соединений с ДНК – ΔG_{total} было использовано уравнение [18],

$$\Delta G_{total} = \Delta G_{vdw} + \Delta G_{el} + \Delta G_{pe} + \Delta\Delta G_{Hb} + \Delta G_{hyd} + \Delta G_{entr}\,; \qquad (3)$$

где G_{vdw} – вклад ван-дер-ваальсовых взаимодействий (межмолекулярных и с водным окружением); ΔG_{el} – электростатический вклад; ΔG_{pe} – полиэлектролитный вклад; $\Delta\Delta G_{Hb}$ – вклад водородных связей; ΔG_{entr} – энергетический эффект изменения трансляционных ΔG_{tr}, ротационных ΔG_{rot} и вибрационных ΔG_{vibr} степеней свободы:

$$\Delta G_{entr} = \Delta G_{tr} + \Delta G_{rot} + \Delta G_{vibr} \qquad (4)$$

$$\Delta\Delta G_{Hb} = -0.25 * 9 * (N_{im} + \Delta N_{solv}) \text{ Kkal/mol}; \qquad (5)$$

где N_{im} – количество межмолекулярных Н-связей, ΔN_{solv} – изменение числа Н-связей с водой (гидратационного индекса) при комплексообразовании.

$$\Delta G_{hyd} = \gamma * \Delta A \rightarrow \gamma = 50 kal/(mol * A^{02})\,; \qquad (6)$$

где γ – микроскопический коэффициент поверхностного натяжения, γ = 50 кал/(моль·Å^2).

Для определения константы связывания всех трех соединений с ДНК были использованы следующие уравнения:

$$K = \exp\left(-\frac{\Delta G_{total}}{RT}\right), \qquad (7)$$

где ΔG_{total} – тотальная энергия взаимодейсвия, R – газовая постоянная, T – абсолютная температура, K – константа связывания.

Результаты и обсуждение

Спектральный метод

Анализ спектральных данных показал, что при взаимодействии Птокс и Этоп с ДНК наблюдаются два типа связывания (данные не приведены). Используя уравнения 1 и 2, были рассчитаны константы связывания и число пар оснований, с которыми связывается одна молекула лиганда. Для Птокс они составили K_1= 64.83 n_1= 4.46, K_2= 6.51 n_2= 3.26. Для Этоп K_1= 79.31 n_1= 18.88, K_2= 0.55 n_2= 5.54, Тен K_1= 0 n_1= 0, K_2= 0 n_2= 0.

Что касается Тен, то прямое взаимодействие с ДНК не наблюдается. Воздействие Тен на молекулярном уровне обусловлено другим типом и механизмом взаимодействия, о чем и свидетельствуют литературные данные [19–23].

Метод молекулярной динамики

Для более детального изучения характеристик и параметров прямого взаимодействия этих соединений был проведен компьютерный эксперимент для выявления энергетических характеристик и возможных сайтов связывания.

Полученные данные свидетельствуют о наличии прямого взаимодействия Птокс и Этоп с ДНК, причем были выявлены места возможного взаимодействия (Рис. 2).

Птокс и Этоп взаимодействуют с концевыми и/или с дефектными участками ДНК. Имеет место также взаимодействие с сахарофосфатым остовом, в А-Т богатых участках, большого желобка ДНК. Отметим тот факт, что взаимодействие происходит за счет образования как водородных связей, так и силами кулоновского взаимодействия (данные не приведены).

Как и при экспериментальном, так и при ММД взаимодействии Тен с ДНК не наблюдается. Используя уравнение (3–7), были рассчитаны константы связывания и число пар оснований, с которыми связывается одна молекула лиганда, полученные ММД: Для Птокс K_1= 57.25 n_1= 3.22, K_2= 5,47 n_2= 2.40. Для Этоп K_1= 62,07 n_1= 18.0, K_2= 0.32 n_2= 4.22, Тен K_1= 0 n_1= 0, K_2= 0 n_2= 0.

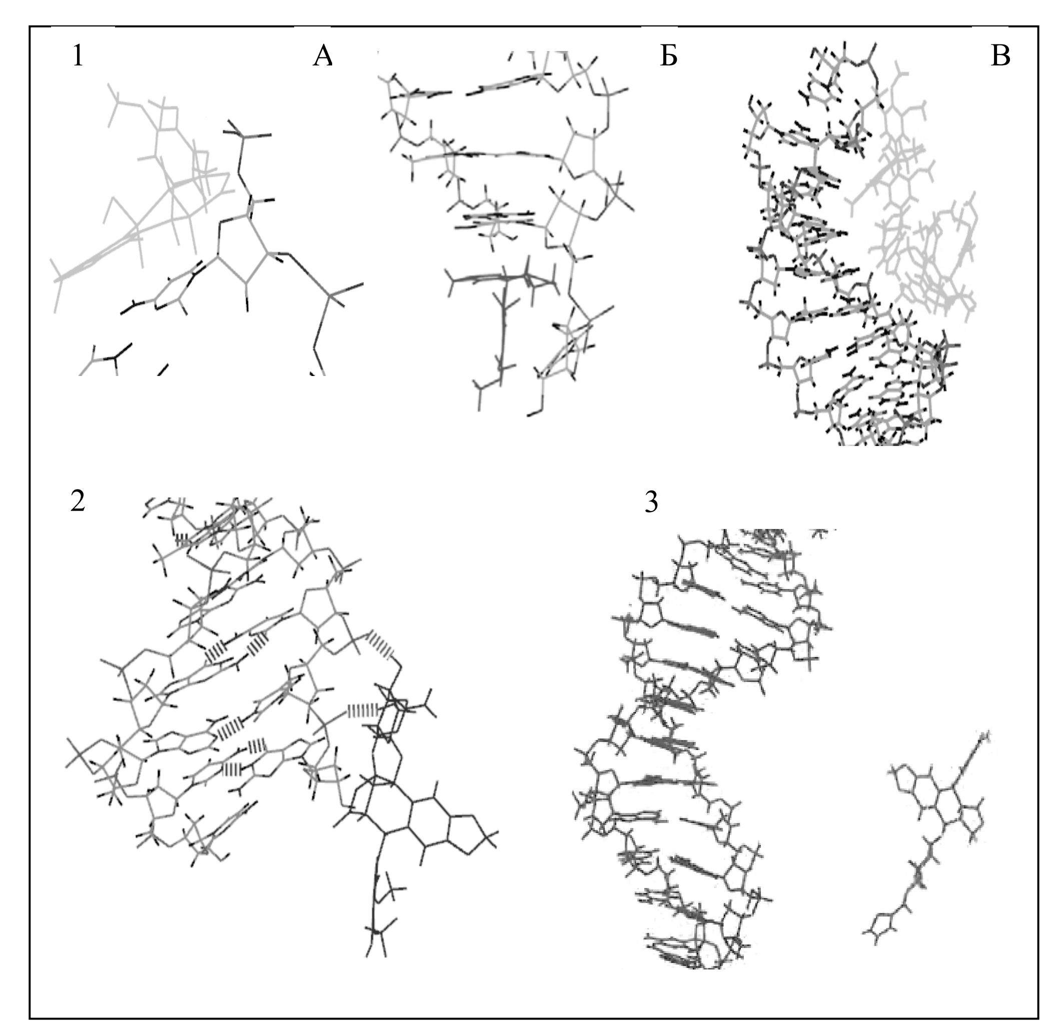


Рис. 2. Возможные места связывания: 1) Птокс на молекуле ДНК: А – коцевой участок, Б – дефектный участок, В – взаимодействие с большим желобком, 2) Этоп на молекуле ДНК (концевой участок), 3) Тен на молекуле ДНК (взаимодействие не наблюдается)

В таб. 1. приведены сравнительные данные, полученные двумя методами для трех соединений при прямом взаимодействии с ДНК.

Таблица 1. Значение констант связывания (K) и число пар оснований, с которыми связывается одна молекула лиганда (n) Птокс, Этоп, Тен с ДНК, полученные экспериментально и методом МД.

Комплекс	Экспериментально				Методом МД			
	n		K_b		N		K_b	
	Тип 1	Тип 2	Тип 1	Тип 2	Тип 1	Тип 2	Тип 1	Тип 2
Птокс/ДНК	4.46	3.26	64.83	6.51	3.22	2.40	57.25	5.47
Этоп/ДНК	18.88	5.54	79.31	0.55	18.0	4.22	62.07	0.32
Тен/ДНК	-	-	-	-	-	-	-	-

Таким образом, полученные нами данные свидетельствуют, что по сравнению с Птокс Этоп сильнее связывается с ДНК, хотя число пар оснований, с которыми связывается одна молекула лиганда, у него меньше, чем у Птокс. Аналогичные результаты получаются с использованием ММД.

ММД наряду с другими методами может использоваться для выявления и расчета характеристик взаимодействия различных соединений и лекарственных препаратов с клеточными структурами.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Вардапетян Г.Р., Рязанова А.С.* Биолог. журн. Армении, 1 (63), 18–22 (2011).
2. *Вардапетян Г.Р., Киракосян А.Б., Оганесян А.А.. Пенесян А.Р., Альферман В.А*. Биотехнология, 3, 37–41 (2002).
3. *Majumder A., Jha S*. Journal of Biol. Sci. 1 (1), 46–69 (2009).
4. *Gordaliza M., García P. del Corral J., Castro, M. Gómez-Zurita M*. Toxicon, 44 (4):. doi:10.1016/j.toxicon.2004.05.008. PMID 15302526 pp. 441–59 (2004).
5. *Damayanthi, Y., Lown Jw.* Curr. Med. Chem. 5 (3):. PMID 9562603, 205–252 (1998).
6. *Binaschi M., Capranico G., Dablo L., Zunino F.* Mol. Pharm., 51, 1053–1059 (1997).
7. *Бабаян Ю.С., Казарян Р.С., Согомонян Л.Р., Аветисян М.Г., Снгрян А.Е., Гарибян Д.В*. Биофизика, 43 (3), 422–426 (1998).
8. *McGhee J.D., Von Hippel P.H.* J. Mol. Biol., 86, 469–489 (1974).
9. *Заседателев А.С., Гурский Г.В., Волькенштейн М.В*. Мол. биол., 5 (2), 245–251 (1971).
10. *Arakelyan V., Babayan Yu., Potikyan G.J.* Biomol. Str. Dyn., 18 (2), 231–235 (2000).
11. *Hess B., Kutzner C., Van der Spoel D., Lindah L.E.* J. Chem. Theory Comput., 4, 435–447 (2008).
12. *Pettersen E., Goddard T., Huang C., et al*. J. Comput Chem., 25 (13), 1605–1612 (2004).
13. *Wang J., Wolf R., Caldwell J., et al*. J. Comput. Chem 25, 1157–1174 (2004).
14. *Wang J., Wang W., Kollman P., Case. D.J.* Mol. Graph. and Mod., 25, 247–260 (2006).

15. *Marvin M*. Chem.Axon (http://www.chemaxon.com) (2012).

16. http://www.rcsb.org/pdb/explore/explore.do?structureId=3bse

17. *Hornak V., Abel R., et al*. Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics, 65, 712–725 (2006).

18. *Костюков. В*. Вісник СевНТУ: зб. наук. пр. Вип. 113/2011. Серія: Фізика біологічних систем і молекул. (2011).

19. *Holthuis J.J.* M.. Pharm. We. Sci. Edition, 10, 101–116 (1988).

20. *Tepper G.C., Studzinski. P*. Cancer Resarch, 52, 3384–3390 (1992).

21. http://www.btherapeutics.com/?page_id=87

22. http://www.accessdata.fda.gov/drugsatfda_docs/label/2011/020119s010s011lbl.pdf

23. http://www.genelabs.com/drugsdb/details/teniposide/

24. *Вардапетян Г.Р., Рязанова А.С.* / Исследование взаимодействия подофиллотоксина и этопозида с ДНК методом флуоресценции/ Биолог. журн. Армении, 1, 63, с. 18–22 (2011).

25. *Вардапетян Г.Р., Киракосян А.Б., Оганесян А.А., Пенесян А.Р., Альферман В.А*. / Накопление лигнанов в каллусных культурах *L. Austriacum* под действием элиситоров/ Биотехнология, 3 с. 37–41 (2002).

26. *Majumder A., Jha S.* / Biotechnological approaches for the production of potential anticancer leads podopyhllotoxin and paclitaxel: an overview/ e Journal of Biol. Sci. vol.1, Issue 1, pp. 46–69 (2009).

27. *Gordaliza M., García P., J. del Corral, Castro M., Gómez-Zurita M.* /Podophyllotoxin: distribution, sources, applications and new cytotoxic derivatives/. Toxicon 44 (4):. doi:10.1016/j.toxicon.2004.05.008. PMID 15302526 pp. 441–59 (2004).

28. *Damayanthi Y., Lown Jw*. /Podophyllotoxins: current status and recent developments/. Curr. Med. Chem. 5 (3):. PMID 9562603, pp. 205–252 (1998).

29. *Binaschi M., Capranico G., Dablo L., Zunino F.* /Relationship between Lethal Effects and TopoisomeraseII-Mediated Double-Stranded DNA Breaks Produced by Anthracyclines with Different Sequence Specificity/ Mol. Pharm., 51, pp. 1053–1059 (1997).

30. *Бабаян Ю.С., Казарян Р.С., Согомонян Л.Р., Аветисян М.Г., Снгрян А.Е., Гарибян Д.В.* / Исследование взаимодействия противоопухолевых соединений митоксантрона и аметантрона с ДНК по характеру изменения спектров КД/ Биофизика, т. 43, вып. 3, с. 422–426 (1998).

31. *McGhee J.D., Von Hippel P.H.* / Theoretical aspects of DNA-protein interactions: cooperative and noncooperative binding of large ligands to a one-dimensional homogeneous lattice/ J. Mol. Biol., 86, p. 469–489 (1974).

32. *Заседателев А.С., Гурский Г.В., Волькенштейн М.В.* / Теория одномерной адсорбции. Адсорбция малых молекул на гомополимере/ Мол. биол., т. 5, N 2, с. 245–251 (1971).

33. *Arakelyan V., Babayan Yu., Potikyan G.* / Determination of constant rates of adsorption of ligand on DNA: Analysis of correlation function / J. Biomol. Str. Dyn., v. 18, N 2, pp. 231–235 (2000).

34. *Hess B., Kutzner C., Van der Spoel D., Lindah L.* / GROMACS 4: Algorithms for Highly Efficient, Load-Balanced, and Scalable Molecular Simulation/ E. J. Chem. Theory Comput. 4, pp. 435–447 (2008).

35. *Pettersen E., Goddard T., Huang C., et al.* /UCSF Chimera-a visualization system for exploratory research and analysis/ J. Comput Chem., 25(13), pp. 1605–1612 (2004).

36. *Wang J., Wolf R., Caldwell J., et al.* /Development and testing of a general AMBER force field/. J. of Comput. Chem 25, pp. 1157–1174 (2004).

37. *Wang J., Wang W., Kollman P., Case D.* /Automatic atom type and bond type perception in molecular mechanical calculations/ J. of Mol. Graph. and Mod., 25, pp. 247–260 (2006).

38. *Marvin M.* / Marvin was used for drawing, displaying and characterizing chemical structures, substructures and reactions, Marvin 5.8.0, ChemAxon (http://www.chemaxon.com), (2012).

39. http://www.rcsb.org/pdb/explore/explore.do?structureId=3bse

40. *Hornak V., Abel R., et al /*Comparison of Multiple Amber Force Fields and Development of Improved Protein Backbone Parameters/ Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics V. 65, pp. 712–725 (2006).

41. *Костюков В.* / Энергетика Связывания Диамидинового Препарата DB293 С ДНК/, Вісник СевНТУ: зб. наук. пр. Вип. 113/2011. Серія: Фізика біологічних систем і молекул (2011).

42. *Holthuis J.J.M.* /Etoposide and teniposide Bioanalysis, metabolism and clinical pharmacokinetics/ Pharm. We. Sci. Edition, v.10, pp. 101–116 (1988).

43. *Clifford Tepper G., Studzinski P.* /Teniposide Induces Nuclear but not Mitochondria DNA Degradation/ Cancer resarch 52, pp. 3384–3390 (1992).

44. http://www.btherapeutics.com/?page_id=87

45. http://www.accessdata.fda.gov/drugsatfda_docs/label/2011/020119s010s011lbl.pdf
http://www.genelabs.com/drugsdb/details/teniposide/

PODOPHYLLOTOXIN AND IT`S SEMISYNTHETIC DERIVATIVES INTERACTION WITH DNA BY MOLECULAR MODELING

L. Hunanyan

The current work is studying the direct interaction of podophyllotoxin, etoposide and tenyposide with DNA using the method of absorption spectroscopy and the method of molecular dynamics. The method of molecular dynamics helped to reveal the possible binding sites. It's determined by two methods of the binding constants and the number of bases pairs on DNA with which one molecule of ligand is binding. Comparative analysis of the received results has been done.

ՊՈԴՈՖԻԼՈՏՈՔՍԻՆԻ ԵՎ ՆՐԱ ԿԻՍԱՍԻՆԹԵՏԻԿ ԱԾԱՆՑՅԱԼՆԵՐԻ ՓՈԽԱԶԴԵՑՈՒԹՅԱՆ ՈՒՍՈՒՄՆԱՍԻՐՈՒԹՅՈՒՆԸ ԴՆԹ-Ի ՀԵՏ, ՄՈԼԵԿՈՒԼԱՅԻՆ ՄՈԴԵԼԱՎՈՐՄԱՆ ՄԵԹՈԴՈՎ

Լ. Հունանյան

Աշխատանքը նվիրված է Պոդոֆիլոտոքսինի, Էտոպոզիդի և Տենիպոզիդի փոխազդեցության ուսումնասիրությանը ԴՆԹ-ի հետ՝ աբսորբցիոն սպեկտրոսկոպիայի և մոլեկուլային դինամիկայի մեթոդների օգնությամբ: Մոլեկուլային դինամիկայի մեթոդի օգնությամբ ցույց է տրված ԴՆԹ-ի հետ հնարավոր կապման տեղերը: Երկու մեթոդներով հաշվարկված են՝ այն կապման տեղերի և հաստատունների արժեքները, որոնք համապատասխանում են մեկ լիգանդին:

Կատարված է ստացված տվյալների համեմատական վերլուծություն:

Поступила 07.02.2013 г.

УДК 577.164.39+352.38

ФРАКЦИОНИРОВАНИЕ ЯДА ГЮРЗЫ (MACROVIPERA LEBETINA OBTUSA) ОБИТАЮЩЕЙ НА ТЕРРИТОРИИ АРМЕНИИ

Д.Г. Оганесян, Г.Г. Гаспарян, Г.Р. Вардапетян

Российско-Армянский (Славянский) университет
hvardapetyan@mail.ru

Аннотация. Целью настоящей работы являлось фракционирование яда гюрзы (*Macrovipera lebetina obtusa*), обитающей на территории Армении, методом гель-хроматографии и выделение компонентов яда, обладающих протеолитической активностью. Были определены оптимальные pH и буферные системы. Показана протеолитическая активность выделенной группы фракций яда *Macrovipera lebetina obtusa* с молекулярной массой от 20 кДа до 31 кДа.
Ключевые слова: яд гюрзы, фракция яда, протеолитическая активность

Введение

Змеиный яд и его компоненты широко используются в качестве иммунодепрессантов, для изучения механизма свертывания крови, изучения молекулярной организации ацетилхолиновых рецепторов. Он также применяется при производстве противозмеиных сывороток. Многолетние опытные данные показали, что деструктивное действие яда в целом намного сильнее воздействия его фракций в отдельности, но при этом и активности фракций отличны и специфичны [3]. Змеиный яд по своему составу очень сложен и не до конца изучен, но при этом известны его главные химические составляющие – это белки, аминокислоты, жирные кислоты, ферменты, микроэлементы [2]. Отдельной задачей является препаративное выделение отдельных фракций и/или групп фракций. Для этих целей наиболее оптимальным является метод гель-хроматографии.

Целью настоящей работы является разработка оптимальной и щадящей методики разделения яда гюрзы *Macrovipera lebetina obtuse*, обитающей на

территории Армении, методом гель-хроматографии [4, 5] и получение отдельных нативных фракций в препаративных количествах.

Материалы и методика

***Приготовление колонки*:** Для приготовления колонки использовался Сефадекс фирмы Molzelekt G 75 с размером частиц 20-80 мкм. Длина колонки – 42,5 см; диаметр – 2,5 см; объём колонки – 209 $см^3$. Колонки калибровали смесью витамина B_{12} ($M_r = 1350$ Да) и «голубого декстрана» ($M_r = 2000$ кДа). Объем одной фракции – 2,1 мл, скорость элюции – 2,1 мл/мин.

Деление яда гюрзы на фракции (гель-хроматография): 20 мг яда гюрзы (оптимальная концентрация для колонки с данными параметрами) растворены в двух мililитрах 10мМ калий-фосфатного буфера (KH_2PO_4) $_{P}$H = 7,2.

В экспериментах использовали высушенный яд *Macrovipera lebetina obtusa,* обитающей на територии Армении, любезно предоставленной институтом физиологии НАН Армении. Яд (10 мг/мл) предварительно растворяли в буферном растворе и после центрифугирования (3 минуты при 12.000 оборотах в минуту) на центрифуге (micro-centrifuge type-320a) пропускали через разделительную колонку. Полученные фракции регистрировали на спектрофотометре (6405UV/Vis. Spectrophotometer, фирмы «JENWAY») при длине волны 280 нм, l = 1 см. После разделения фракции собирали и лиофилизировали в лиофилизаторе («Иней»).

Определение казеинолитической активности фракций

Определение казеинолитической активности в образцах проводили, используя в качестве субстрата казеин [6]. Навеску сухих фракций яда (0,6–0,8 мг) растворяли в физиологическом растворе и инкубировали 15–20 мин. при 37°C для полного растворения. Реакционная смесь состояла из 1 мл раствора фракций и 1 мл 2%-го казеина в 0,4 M Tris-HCL буфере (pH = 8,2). Реакцию запускали добавлением субстрата и проводили 30 мин. при 37°C. Затем добавляли двойной объем 5%-ой охлажденной трихлоруксусной кислоты (ТХУ), инкубировали 20–30 мин. при комнатной температуре до полного формирования осадка.

Результаты и обсуждение

После гель-хроматографии тотального яда *Macrovipera lebetina obtusa* было собрано 85 фракций по 2,1 мл каждая, из которых были инден-тифицированы 4 основные группы. В группы были объединены: 1-я группа – от 40 кДа и выше (4-ая – 12-ая фракции), 2 группа – от 20 кДа до 31 кДа (13-ая – 35-ая фракции), 3 группа – от 2 кДа до 5 кДа (47-ая – 65-ая фракции), 4 группа – до 1,5 кДа (69-ая – 87-ая фракции). Из хроматограммы было определено

процентное содержание отдельных групп фракций: 1)37,5 %, 2)33,7%, 3)8,9%, 4)19,9%, соответственно (рис. 1).

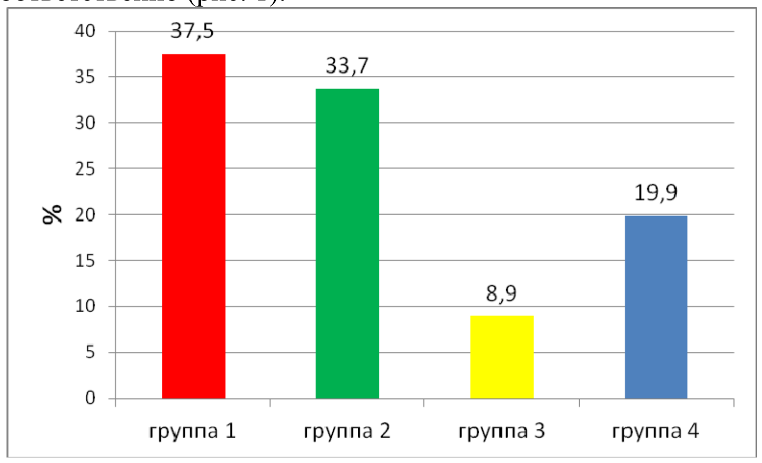


Рис. 1. Процентное содержание отдельных групп фракций.

После лиофилизации выделенных групп определялась протеолитическая активность по описанной выше методике. Было показано, что протеолитической активностью обладает 2 группа фракций. Другие фракции аналогической активностью не обладали.

Полученные нами данные о протеолитической активности подтверждают давно известный, но недостаточно освещенный в литературе факт отличия свойств яда армянской гюрзы [2].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бабаян Б.Г., Вардапетян Г.Р., Антонян М.В., Геворгян С.С., Восканян А.В.* Энзиматическая активность фракций яда гюрзы Macrovipera lebetina obtusa in vitro. Вестник РАУ, №1, 80-83 (2010).

2. *Султанов М.Н., Туракулов Я.Х., Сахибов Д.Н.* «Яды змей». Горький: Русский врач (1973).

3. *Орлов Б.Н., Гелашвили Д.Б., Ибрагимов А.К.* Ядовитые животные и растения СССР., М.: Высшая школа (1990).

4. *Tsai, Inn-Ho; Tsai, Hsin-Yu; Wang, Ying-Ming; Tun-Pe; Warrell, David A*. Venom phospholipases of Russell's vipers from Myanmar and eastern India – Cloning, characterization and phylogeographic analysis. *BBA* – Proteins and Proteomics, 1774, № 8, 1020–1028 (2007).

5. *Fuly A.L, Calil-Elias S., Martinez A.M, Melo P.A, Guimarães J.A*. Myotoxicity induced by an acidic Asp-49 phospholipase A (2) isolated from Lachesis muta snake venom. Comparison with lysophosphatidylcholine. Int J Biochem Cell Biol, 35, №10, 1470-1481 (2003).

6. *Murata Y., Satake M., Suzuki T.* Studies on snake venom. XIII. Chromatographic separation and properties of three proteinases from Agkistrodon halys blomhoffii venom. J. Biochem 53, № 6 (1963).

FRACTIONATION OF ARMENIAN VIPER (MACROVIPERA LEBETINA OBTUSA) VENOM

D.H. Hovhannisyan, G.G. Gasparyan, H.R. Vardapetyan

The aim of this study was the Armenian viper (*Macrovipera lebetina obtusa*) venom fractionation by gel chromatography and investigation of the separate fractions proteolytic activity. The optimal pH and buffer system for venom fractionation was determined. It was shown that *Macrovipera lebetina obtusa* venom fractions with molecular weight from 20 kDa to 31 kDa had proteolytic activity.

Keywords: venom, fractions, proteolytic activity.

ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ՏԱՐԱԾՔՈՒՄ ԲՆԱԿՎՈՂ ԳՅՈՒՐՁԱՅԻ (MACROVIPERA LEBETINA OBTUSA) ԹՈՒՅՆԻ ԲԱԺԱՆՈՒՄԸ ՖՐԱԿՑԻԱՆԵՐԻ

Դ.Հ. Հովհաննիսյան, Գ.Գ. Գասպարյան, Հ.Ռ. Վարդապետյան

Տվյալ աշխատանքի շրջանակներում կատարվել է Հայաստանում բնակվող գյուրզայի թույնի բաժանումը ֆրակցիաների գել-քրոմոտոգրաֆիկ մեթոդով: Որոշվել է օպտիմալ pH-ը և բուֆերային համակարգը: Ցույց է տրվել առանձնացված խմբի (մոլեկուլային զանգվածի 20-ից մինչև 31 կԴա) թույնի ֆրակցիների պրոտեոլիտիկ ակտիվությունը:

С О Д Е Р Ж А Н И Е

Математика и информатика

Malinyan A. Characterization of n-independent sets of $\leq 3n$ points in R^d 3

Маргарян В.Н., Айрапетян С.Р. О некоторых свойствах гипоэллиптических относительно группы переменных многочлена 16

Физика, химия, биология

Овакимян Л.Б. О транспортном сечении в борновском пределе малоуглового рассеяния 27

Арустамян Д., Багунц Г. Классические решения трехчастичных моделей Калоджеро 32

Бадалян Г.Г. Изучение изменений химического потенциала амфифильной молекулы в фосфолипидном бислое.. 42

Данагулян Г.Г., Туманян А.К., Айрапетян К.К. Синтез замещенных бис-пиримидинилдиаминов 49

Вардаиетян Г.Р., Тирацуян С.Г., Рухкян М.Л. Активность ферментов антиоксидантной системы листьев лавра из различных регионов Южного Кавказа 57

Унанян Л.С. Молекулярное моделирование взаимодействия подофиллотоксина и его синтетических производных с ДНК 67

Оганесян Д.Г., Гаспарян Г.Г., Вардапетян Г.Р. Фракционирование яда гюрзы Macrovipera Lebetina Obtusa, обитающей на территории Армении............. 76

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

А. Малинян – аспирант кафедры математики и математического моделирования РАУ

В.Н. Маргарян – д.ф-м.н, профессор, профессор кафедры математики и математического моделирования РАУ

С.Р. Айрапетян – к.ф.-м.н., старший преводаватель кафедры математики и математического моделирования РАУ

Л.Б. Овакимян – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник Института радиофизики и электроники НАН РА, Аштарак-2

Д. Арустамян – аспирант Арцахского государственного университета

Г. Багунц – к.ф.-м.н., декан инженерного факультета Арцахского государственного университета

Г.Г. Бадалян – к.ф.-м.н.,.доцент кафедры общей физики ЕГУ

Г.Г. Данагулян – д.х.н., профессор, член-корр.НАН РА, профессор кафедры общей и фармацевтической химии РАУ

А.К. Туманян – соискатель кафедры общей и фармацевтической химии РАУ

К.К. Айрапетян – магистрант химического факультета АГПУ им.Х.Абовяна

Г.Р. Вардапетян – д.б.н., профессор, заведующий кафедрой молекулярно-клеточной биологии и медицинской биохимии РАУ

С.Г. Тирацуян – к.б.н., доцент, доцент кафедры молекулярно-клеточной биологии и медицинской биохимии РАУ

М.Л. Рухкян – аспирант кафедры молекулярно-клеточной биологии и медицинской биохимии РАУ

Л.С. Унанян – аспирант кафедры молекулярно-клеточной биологии и медицинской биохимии РАУ

Д.Г. Оганесян – аспирант кафедры молекулярно-клеточной биологии и медицинской биохимии РАУ

Г.Г. Гаспарян – аспирант кафедры молекулярно-клеточной биологии и медицинской биохимии РАУ

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

Правила для авторов журнала «Вестник РАУ, Физико-математические и естественные науки»

Журнал печатает оригинальные статьи по различным направлениям физико-математических и естественных наук.

- К рассмотрению принимаются статьи на русском или английском языках.
- Статьи должны быть представлены в жесткой и электронной форме.
- К материалам статьи прилагается Договор с издательством РАУ, подписанный одним (ответственным) автором (оформляется в одном экземпляре).
- Статья должна иметь направление от учреждения, в котором выполнена работа. Рукопись подписывается автором (соавторами) с указанием фамилии, имени, отчества, домашнего адреса, места работы, номеров телефонов и e-mail. Необходимо указать, с кем вести переговоры и переписку. Отклоненные статьи не возвращаются.
- В редакцию направляются два экземпляра статьи, набранные шрифтом 12 пунктов через два интервала на одной стороне листа (приблизительно 30 строк на странице, 60 символов в строке). Рукописные вставки не допускаются. Все страницы должны быть пронумерованы.

Перед текстом статьи указываются:

– название статьи;

– инициалы и фамилии авторов (для иностранных авторов на языке оригинала или на английском языке);

– название учреждения (без сокращений и аббревиатур), которое направляет статью, его адрес (город, страна);

– e-mail авторов.

Далее помещается аннотация объемом не более 0.5 машинописной страницы, которая не должна дублировать вводный или заключительный разделы. Аннотация не должна содержать литературных ссылок и аббревиатур. В конце аннотации указываются ключевые слова (keywords). Требуется также аннотация на английском языке.

- Изложение материала должно быть ясным и кратким, без формул и выкладок промежуточного характера и громоздких математических выражений.
- Рисунки представляются в двух экземплярах. Все надписи на рисунке следует давать на английском языке.
- Формулы следует набирать крупно, свободно и четко.

Нумерация формул должна быть сквозной по всей статье (не по разделам).

– Химические формулы, математические символы, сокращения (в том числе в индексах), единицы измерения набираются прямым шрифтом.

– Жирным шрифтом набираются только векторные величины (стрелка сверху не нужна).

– Греческие, готические и «рукописные» буквы должны легко распознаваться.

– Все остальные символы набираются курсивом.

- Таблицы должны быть напечатаны на отдельных листах, включенных в общую нумерацию текста. Обязательно наличие заголовков и единиц измерения величин. Все столбцы таблицы должны быть озаглавлены.
- Список литературы должен быть набран на английском языке и оформлен следующим образом:

– для книг – инициалы и фамилии *всех* авторов, название книги, издательство, место издания, год издания в круглых скобках, том;

– для периодических изданий – инициалы и фамилии всех авторов, название журнала, том, – номера первой и последней страниц статьи, год издания в круглых скобках.

Нумерация ссылок должна соответствовать порядку их упоминания в тексте.

Адрес Редакции научных изданий Российско-Армянского
(Славянского) университета:
0051, г.Ереван, ул. Овсепа Эмина, 123
тел./факс: (+374 10) 27-70-52, (внутр. 42-02)
e-mail: mvolskaya@rambler.ru

Заказ № 1
Подписано к печати 19.04.2013г.
Формат $60x84^1/_{16}$. Бумага офсетная №1.
Объем 5.3 усл. п.л. Тираж 100 экз.
Отпечатано в типографии: «Пайлун»
0012 г. Ереван, ул. Адонца 14, корп. 7
www. payloon.am
payloon @payloon.am
тел.: (+374 10) 23-08-90
факс: (+374 10) 29-70-90